ا. سوكولوف، ا. تيرنوف. ف. جوكوفسكي

الميكانيكا الكوانتية

ترجمة

الدكتور حسن سلمان



دار «مير» موسكو

القسـم الأول

الميـكانيـكا الكوانتيـة اللانسـبية

البند ١ ـ المدخل

أ) النظرية التقليدية (الكلاسيكية) . من المعلوم أن تطور الالكتروديناميكا (علم التحريك الكهربائى) التقليدية تتوج بنظرية ماكسويل ـ لورنتز والميكانيكا التقليدية التى أخذت بعين الاعتبار التأثيرات النسبية .

وتعتبر النظرية التقليدية الضوء موجات توصف ميزاتها بمعادلات من النوع التالى :

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} - \nabla^2\varphi = 0 \qquad (1.1)$$

ومن المفروض ان تحقق المعادلة (1.1) أيضا مركبات متجهى (شعاعى) الشدتين الكهربائية والمغناطيسية لمجال (حقل) الموجة الضوئية المنتشرة بالسرعة c . أما الالكترونات فتعتبرها النظرية التقليدية جسيمات نقطية تتحرك وفقا لقوانين الميكانيكا بتأثير قوة لورنتز ، وتوصف حركتها إما بمعادلة نيوتن وإما بمعادلة لاغرانج وإما بمعادلة هاملتون أو معادلة هاميلتون ـ جاكوبى ، إذ تؤدى المعادلات المذكورة كلها إلى نتيجة واحدة (لأنها من حيث الجوهر تعدّ أشكالا مختلفة لمعادلة نيوتن) ولذا يمكن تعميمها بسهولة على الحالة النسبية أيضا .

تتميز العملية (الظاهرة) الموجية بترددها (بتواترها) ν وطول موجتها λ اللذين يرتبطان ببعضهما البعض بالعلاقة $\nu\lambda = c$. وعليه فإن فى أبسط الحالات ، أى فى حالة الموجة المستوية المنتشرة بامتداد المحور x سيكون حل المعادلة (1.1) بالشكل التالى :

$$\varphi = Ae^{-2\pi i\left(\nu t - \frac{x}{\lambda}\right)} \qquad (1.2)$$

لكن ، غالبا ما يعوض عن التردد ν بتردد زاوى (دائرى) $\omega = 2\pi\nu$ وعن λ بالشعاع الموجى k ، وبأخذ ذلك بعين الاعتبار سيكون لدينا فى حالة الموجة المستوية المنتشرة فى الاتجاه k ما يلى :

$$\varphi = Ae^{-i(\omega t - kr)} \qquad (1.3)$$

وبتبديل (1.3) فى (1.1) نجد أن :

$$\omega = ck \qquad (1.4)$$

أى أن معامل (القيمة المطلقة) المتجه الموجى مرتبط بطول الموجة λ بالعلاقة التالية :

$$\frac{2\pi}{\lambda} = k \qquad (1.5)$$

ان الحركة الحرة للألكترون ، باعتباره جسيما نقطيا ، تتميز بطاقته E واندفاعه p المرتبطين فى الحالة اللا نسبية بالعلاقة :

$$E = \frac{p^2}{2m_0} \qquad (1.6)$$

أما فى الحالة النسبية فتصبح العلاقة (1.6) من الشكل التالى :

$$E^{rel} = \sqrt{c^2p^2 + m_0^2c^4} \qquad (1.7)$$

وإذا انعدمت كتلة سكون الجسيم فإن (1.7) تصبح كما يلى :

$$E^{rel} = cp \qquad (1.8)$$

وعند الانتقال إلى الحالة اللانسبية $(p \ll m_0c)$ أى

$\left(\beta^2 = \left(\frac{v}{c}\right)^2 \ll 1\right)$ ، نجد من (1.7) أن :

$$E = E^{rel} - m_0c^2 = \frac{p^2}{2m_0} \qquad (1.9)$$

وإذا عوضنا عن كتلة السكون m_0 بالمقدار التالى :

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}} \qquad (1.10)$$

عندئذ يمكن كتابة (1.7) بالشكل التالى* :

$$E^{rel} = mc^2, \quad p = mv \qquad (1.11)$$

(ب) **النظرية الكوانتية للضوء** . لقد لوحظت الخواص الجسيمية للضوء للمرة الأولى عند دراسة ما يسمى بالاشعاع المتوازن الذى يتولد داخل تجويف محاط بحواجز مسخنة عند درجة حرارة معينة وثابتة أو الذى يسمى عادة باشعاع الجسم المطلق السواد . ولندرس الكثافة الطيفية $p(\omega)$ للاشعاع المتوازن المرتبطة بكثافة المجال الكهرطيسى العادية $u_{rad} = \frac{1}{8\pi}(\mathscr{E}^2 + \mathscr{H}^2)$ بالعلاقة الآتية :

$$u_{rad} = \int_0^\infty \rho(\omega)\, d\omega \; , \qquad (1.12)$$

حيث E ، H - شدتا المجالين (الحقلين) الكهربائى والمغناطيسى على الترتيب . وبما أن الكثافة الطيفية لا تتعلق بالضرورة بمادة الحواجز وانما بدرجة حرارتها فقط ، لذا عند تعيين $p(\omega)$ نستطيع أن نختار أبسط نموذج للحواجز ونحسبه بشكل تقريبى بجمع الذبذبات التوافقية . وتبين أنه فى اطار النظرية التقليدية لا يمكن بناء نظرية معقولة للاشعاع المتوازن ، ولذلك اقترح بلانك عام ١٩٠٠ فرضية جديدة تماما تتناقض مع المفاهيم الأساسية للفيزياء التقليدية ، جوهرها يتخلص فى أنه يمكن أن لا تأخذ طاقة الجسيمات

---

* سنهمل كتابة الرمز rel فى المستقبل عند كتابة طاقة الاكترون لأن القارىء سيفهم من سياق الكلام ، عن أى من الطاقتين نتحدث .

المجهرية (الذرات ، الجزيئات) قيما مستمرة فقط بل ومنقطعة أيضا . فإذا أخذنا الهزاز كحالة خاصة ، فإن طاقته يجب أن تكون مضاعفات للطاقة الصغرى $\hbar\omega$ ، حيث ω - تردد اهتزازات الهزاز و $\hbar$ - مقدار ثابت ، أى أن :

$$E_n = n\hbar\omega \qquad (1.13)$$

حيث $n = 0,1,2,3,...$ لنلاحظ أن بلانك كتب العلاقة (1.13) بشكل آخر هو :

$$E_n = nh\nu \qquad (1.13\ a)$$

وهذا يكافىء تماما (1.13) ، إذا اعتبرنا أن التردد العادى (وليس الدائرى) هو $\nu = \omega/2\pi$ وأن $h = 2\pi\hbar$. وسنرى فيما بعد أن الهدف من استعمال ω و $\hbar$ بدلا من ν و h هو التبسيط فقط . ولقد حصل بلانك ، انطلاقا من العلاقة (1.13 a) على معادلة الكثافة الطيفية للاشعاع المتوازن التالية :

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 \left(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1\right)} \qquad (1.14)$$

حيث k_B - ثابت بولسمان . ونستطيع من معادلة بلانك الحصول على معادلة كثافة الاشعاع التالية :

$$u_{rad} = \int_0^\infty \rho(\omega)\, d\omega = \frac{\pi^2 k_B^4}{15 c^3 \hbar^3} T^4 = \frac{4\sigma}{c} T^4 \qquad (1.15)$$

التى تسمى بقانون ستيفان - بولسمان الذى اكتشف تجريبيا قبل ظهور علاقة بلانك ؛ ومنها أيضا نحصل على قانون العالم فين للازاحة :

$$\lambda_{max} T = \frac{2\pi c\hbar}{4{,}965 k_B} = b \qquad (1.16)$$

الذى يحدد أكبر طول للموجة λ_{max} المقابلة للاشعاع الأعظم عند الانتقال من الكثافة $\rho(\omega)$ إلى الكثافة $\rho(\lambda)$. وبما أن كلا من ثابتى ستيفان - بولسمان ($\sigma = 5{,}67 \cdot 10^{-5} g \cdot s^{-3} \cdot deg^{-4}$) وفين ($b = 0{,}29$ cm·deg) كانا

تجريبيا فلقد تمكن بلانك من حساب القيمة العدديَة للثابت ($h = 6{,}626 \cdot 10^{-27} erg \cdot s$) ، الذى سمى بثابت بلانك* والقيمة العددية لثابت بولسمان ($k_B = 1{,}38 \cdot 10^{-16} erg \cdot deg^{-1}$) ، مع العلم أن k_B كان معلوما من تجارب سابقة (مثلا من الفيزياء الاحصائية التقليدية لأنه يدخل فى دالة توزع ماكسويل - بولسمان ($f = Ae^{-E/k_B T}$) .

ان تاريخ اكتشاف ثابت بلانك (١٩٠٠) يعتبر بحق يوم ميلاد النظرية الكوانتية الحديثة . ويجب أن نشير إلى أنه عند الانتقال من النظرية الكوانتية إلى التقليدية ينبغى علينا أن نفترض أن $\hbar = 0$. وعندئذ تتحول علاقة بلانك إلى علاقة ريلى - جينس المعروفة :

$$\rho(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T \qquad (1.17)$$

التى تعطى قيمة لانهائية لكثافة الاشعاع الكلية ، أى أن :

$$u_{изл} = \int_0^\infty \rho(\omega)\, d\omega = \frac{k_B T}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega^2\, d\omega = \infty$$

وهذا يعنى أنه بالرغم من كل المعطيات التجريبية ، تنص النظرية التقليدية أنه لا يمكن بلوغ التوازن الترموديناميكى بين الجسم الساخن والاشعاع . وبصورة عامة فإن علاقة ريلى - جينس تعين منحنى التوزع الطيفى بدقة فى مجال التواترات (الترددات) المنخفضة فقط ($\hbar\omega \ll k_B T$) . أما فى مجال التواترات الكبيرة ($\hbar\omega \gg k_B T$) فهى تعطى نتيجة غير معقولة اطلاقا . وهذا ما سماه ارنفست « الكارثة فوق البنفسجية » . ولم تختف هذه الكارثة إلاّ بعد ظهور نظرية بلانك الكوانتية .

لقد افترض بلانك عند استخلاص دستوره أن لطاقة الهزاز التوافقى قيما متقطعة فقط غير أن هذه الخاصة الجديدة للهزاز بقيت بدون مدلول فيزيائى

---

* أما الثابت $\hbar = h/2\pi$ الذى يسمى أيضا بثابت بلانك فيساوى $\hbar = 1{,}055 \cdot 10^{-27} erg.s$.

(وبصورة أدق فإن بلانك نفسه أعطى هذه « الصفات الخاصة » للأجسام المسخنة أى للهزازات التوافقية وليس للاشعاع الكهرطيسى) .

أما الخطوة الهامة الثانية على طريق نظرية « الكوانتات » فقد خطاها أينشتين الذى اقترح فرضية جديدة اعتبر فيها أن كمات طاقة الهزاز مرتبطة ارتباطا وثيقا بتلك الحقيقة التى تنص على أن الاشعاع الكهرطيسى نفسه يتألف من جسيمات منفصلة عن بعضها البعض هى فوتونات تحمل الطاقة $\hbar\omega$. وطبقا لفرضية أينشتين يمكن تصوّر المجال الكهرطيسى كجملة من الجسيمات - الفوتونات كتلة سكونها معدومة وطاقتها تتحدد بالشكل التالى :

$$\varepsilon = \hbar\omega \qquad (1.18)$$

وعندئذ نحصل على علاقة اندفاع الفوتون التالية :

$$p = k^0 \frac{\hbar\omega}{c} = k^0 \frac{h}{\lambda} = \hbar k \qquad (1.19)$$

حيث $k = \frac{2\pi k^0}{\lambda}$ الشعاع الموجى ، و k^0 - شعاع الواحدة فى اتجاه اندفاع الفوتون و $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ - العدد الموجى . وقد صاغ أينشتين ، انطلاقا من هذه التصورات ، النظرية الكمية للفعل الكهرضوئى الذى أكتشفه هرتز عام ١٨٨٧ ودرسه بالتفصيل الفيزيائى الروسى ستوليتوف . ويتجلى تأثير الفعل الكهرضوئى عند دراسة العلاقة بين ظهور الشرارة وفرق الكمون (الجهد) ، إذ تظهر الشرارة بوجود ضوء كبير التردد (التواتر) عند فرق من الكمون أقل مما هو عليه فى غياب الضوء . ولتعليل هذه الظاهرة اقترح أينشتين المعادلة البسيطة التالية :

$$\frac{m_0 v^2}{2} = \hbar\omega - W$$

التى تعبر عن توازن الطاقة ، وتعنى أن طاقة الالكترون المتطاير الحركية $\frac{m_0 v^2}{2}$ يجب أن تساوى الفرق بين طاقة الفوتون الممتص والعمل (الشغل) اللازم لانتزاع W الالكترون من المعدن . ومن الواضح أن

الالكترونات لا تستطيع الخروج من المعدن عندما $W > \hbar\omega$ وهى تنزع فقط فى الحالة التى تكون فيها طاقة الفوتونات أكبر من W .

وقد أكد التحقيق التجريبى لنظرية أينشتين فى الفعل الكهرضوئى أن طاقة الالكترونات المتطايرة تتعلق فقط بتواتر (لا بشدة) الضوء الوارد بحيث أن الالكترونات الضوئية (الالكترونات الخارجة بالتأثير الضوئى) تبدأ بالاقلاع عندما يتجاوز تردد الضوء ω القيمة الحدية ، أى أن :

$$\omega > \frac{W}{\hbar}$$

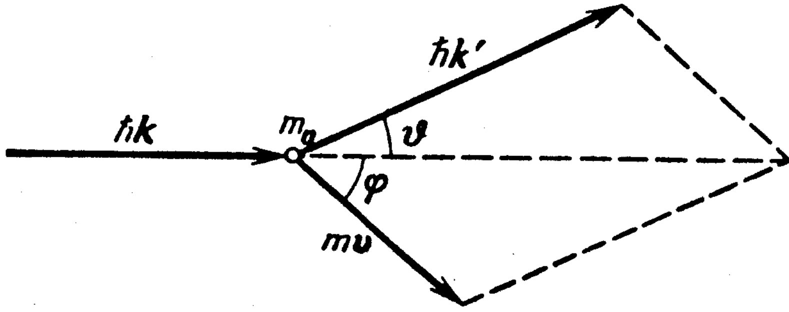
لقد تأكدت تجريبيا بشكل قاطع نتائج نظرية الفوتونات فى عام ١٩٢٣ عند دراسة تبدد (تشتت) أشعة رونتجن بالالكترونات الحرة (ظاهرة كومبتون) لذا فانها تستدعى الاهتمام ليس بسبب تحقيقها لقانون مصونية الطاقة فحسب ، بل بسبب تحقيقها لقانون مصونية الدفع (كمية الحركة) أيضا .

فمن المعلوم فى النظرية التقليدية أن تواتر الضوء لا يتغير عند تشتته بالالكترونات الحرة $(\omega' = \omega)$ ، ولكن يمكن أن تتناقص شدة الحزمة الضوئية الواردة لأن قسما من طاقتها يضيع على تهييج الالكترونات . أما فى النظرية الكوانتية فإن قسما من طاقة الفوتون $\varepsilon = \hbar\omega$ يقدّم للالكترون ، ولذلك فان طاقة الفوتون المتشتت $\varepsilon' = \hbar\omega'$ وبالتالى تواتره يجب أن يكونا أقل $(\varepsilon' < \varepsilon, \omega' < \omega)$.

ولحساب تابعية التواتر لزاوية التبدد نكتب قانونى مصونية الطاقة والدفع معتبرين الالكترونات والفوتونات جسيمات (انظر الشكل ١ ـ ١) ، أى أن :

$$\hbar\omega - \hbar\omega' = c^2(m - m_0), \quad \hbar k - \hbar k' = mv \qquad (1.20)$$

حيث m_0 , $m = m_0/\sqrt{1-\beta^2}$ ـ كتلتا الالكترون قبل (عند سكونه)



الشكل ١ ـ ١ . تشتت (تناثر) الضوء على الكترون حر (ظاهرة كومبتون) .

الاصطدام وبعده على الترتيب و v ـ سرعته و $\beta = v/c$ أما $\hbar k = \hbar\omega/c$ ، $\hbar k' = \hbar\omega'/c$ فهما دفعا الفوتون قبل التبدد وبعده .

لنكتب المعادلة (1.20) بالشكل التالى :

$$\omega - \omega' = \frac{c^2}{\hbar}(m - m_0), \quad k - k' = \frac{mv}{\hbar} \qquad (1.21)$$

وبتربيع هاتين المعادلتين وطرح الأولى من الثانية نجد أن :

$$\omega\omega'(1 - \cos\vartheta) = \frac{m_0 c}{\hbar}(c\omega - c\omega'). \qquad (1.22)$$

وبما أن $\lambda = 2\pi c/\omega$ ، $\lambda' = 2\pi c/\omega'$ نجد بعد تقسيم (1.22) على $\omega\omega'$ ، صيغة لحساب الزيادة فى طول موجة الضوء المتبدد ، أى أن :

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2\lambda_0 \sin^2\frac{\vartheta}{2} \qquad (1.23)$$

حيث λ_0 ـ الطول الكومبتونى لموجة للالكترون

$$\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar}{m_0 c} = \frac{h}{m_0 c} = 2{,}4 \cdot 10^{-10}\,\text{cm} \qquad (1.24)$$

وعليه نجد ، من وجهة نظر التصورات الكوانتية أن طول موجة الضوء المتناثر λ' يجب أن تكون أكبر من λ $(\lambda' > \lambda)$ لأن $\omega > \omega'$ وهو يزداد بازدياد زاوية التبدد ϑ . وبما أن الطول الكومبتونى λ_0 مقدار صغير ، فان التبدد الكومبتونى يلاحظ تجريبيا عند الموجات القصيرة (أشعة رونتجن ،

الكوانتات ـ جاما) أما إذا حسبنا $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ للضوء المرئى ($\lambda \sim 10^{-5}cm$)
نجد أن :

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \sim \frac{\lambda_0}{\lambda} \sim 10^{-5} = 10^{-3}\% \qquad (1.25)$$

أما من أجل أشعة رونتجن ($\lambda \sim 10^{-8} \div 10^{-9}cm$) فنجد أن :

$$\frac{\lambda_0}{\lambda} \sim 10^{-1} = 10\% \qquad (1.26)$$

جـ) الخواص الموجية للالكترونات . طبقا لفرضية دوبرويل يجب أن تكون لتيار الالكترونات ذات الطاقة E والدفع p المرتبطين فيما بينهما بالعلاقتين (1.7) و (1.11) خواص موجية. وان التواتر وطول الموجة يجب أن يساويا

$$E = \hbar\omega, \quad \lambda = \frac{h}{p} \qquad (1.27)$$

وقد سميت λ لحزمة الالكترونات ، بالطول الدوبرويلى للموجة وهكذا تعمم علاقتا أينشتين المصاغتان للفوتونات على الالكترونات ولذلك نكتبها للحالتين بالشكل التالى :

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k \qquad (1.28)$$

لنعين أولا القيمة التقريبية للطول الدوبرويلى ، الذى يمكن أن يكون عمليا لحزمة من الالكترونات . ولكى ندرس الخواص الموجية للالكترونات من الضرورى أولا الحصول على حزمة الكترونية وحيدة اللون (من حيث السرعة) ويتحقق ذلك بواسطة جهاز يسمى « بالمدفع الالكترونى » ، حيث تسرع الالكترونات فى الفراغ ثم تمر بين قطبين كهربائيين مختلفى الكمون ، ولذلك نستطيع حساب سرعتها من العلاقة التالية :

$$\frac{m_0 v^2}{2} = \frac{e_0 \Phi}{300} \qquad (1.29)$$

حيث Φ ـ فرق الكمون بين الكاتود والشبكة الأنودية ، يقاس بالفولط ،

و e_0 ـ شحنة الالكترون . وبتطبيق (1.27) نحصل على الطول الدوبرويلى للموجة ، أى أن :

$$\lambda = \frac{h}{m_0 v} = \frac{h\sqrt{150}}{\sqrt{m_0 e_0 \Phi}} = \frac{1{,}2 \cdot 10^{-7}}{\sqrt{\Phi}} \text{ cm} \qquad (1.30)$$

مع العلم أن Φ يجب أن لا تكون أصغر من (15-20 V) ، إذ أن هذا الكمون يجب أن يعطى للالكترونات طاقة أكبر من طاقة الحركة العشوائية فى المعدن ولهذا سيكون الطول الدوبرويلى للموجة $\lambda = 10^{-8}$cm أى ما يعادل الطول الموجى لأشعة رونتجن اللينة . لقد اكتشف العالمان دافيدسون وجرمور الخواص الموجية للالكترونات عام ١٩٢٧ فى تجاربهما المكرسة لدراسة انعراج الالكترونات . وبما أى الطول الدوبرويلى للحزم الالكترونية هو من رتبة 10^{-8}cm ، لذا اختيرت شبكة الانعراج بشكل بلورات معامل شبكتها صغير بالنسبة للطول الدوبرويلى للموجة λ ، وعمم تارتاكوفسكى وتومسون (١٩٢٨) الطريقة التى ابتكرها ديباى وشيرير لدراسة أشعة رونتجن على الموجات الالكترونية ، إذ مررا خلال صفيحة بلورية حزمة من الالكترونات مشابهة لحزمة أشعة رونتجن ، ولذلك حصلا على ما يسمى بالصور الالكترونية التى لاقت تطبيقا هاما عند دراسة بنية البلورات .

ويلاحظ أخيرا أن علاقة دوبرويل لا تنطبق على الالكترونات فحسب ، وإنما على الجسيمات الأخرى كالبروتونات والنترونات وحتى على الذرات المعقدة والجزيئات . وفى الحقيقة يكون الطول الدوبرويلى للموجة لها صغيرا جدا بسبب كتلتها الكبيرة . وقد استطاع شتيرن و ستيرمان مشاهدة انعراج ذرات الهليوم وجزيئات الهيدروجين عند انعكاسها عن بلورات LiF

ان طريقة دراسة بنية المادة على أساس انعراج النترونات ناجعة جدا ،

فالنترونات التى لا تحمل أى شحنة تستطيع حتى عند الطاقة الصغيرة (تسمى بالنترونات الحرارية) أن تخترق المادة ، عندما لا ينعدم طول موجة دوبرويلى عمليا . وبناء على الحقائق المذكورة نستطيع أن نستخلص أن الخواص الموجية يجب أن تلازم كل الجسيمات مبدئيا .

لقد وضعت فرضية دوبرويل أسس فرع فيزيائى جديد هو الضوء الالكترونى ، الذى يدرس الخواص الموجية للحزم الالكترونية . ولقد كان أهم تطبيق لهذا الفرع هو اختراع المجهر الالكترونى ، الذى تفوق قوة تكبيره المجاهر العادية بكثير* . إذ أن قوة تكبير أى مجهر تتعين طبقا لطول موجة الضوء ، ولكى نزيد من التكبير ينبغى أن نصغّر طول موجة الضوء الوارد إلى أصغر ما يمكن . ولكن هذا التصغير يقف عند حد معين : فمثلا لا يمكن بناء مجهر رونتجنى بسبب عدم وجود عدسات ملائمة ، بينما يمكن تجميع الحزم الالكترونية بسهولة فى محرق (بؤرة) بواسطة الحقول الكهرطيسية (عدسات كهربائية ومغناطيسية) ، ولقد طبق هذا المبدأ فى المجاهر الالكترونية .

د) السرعة الطورية (الصفحية) . من المعلوم أنه يمكن وصف حركة الموجة المستوية وحيدة اللون باتجاه المحور x بالدالة التالية :

$$\varphi = Ae^{-i(\omega t - kx)} \qquad (1.31)$$

وتحسب سرعة انتشار الموجة كسرعة انتقال طور ثابت ، أى أن :

$$\omega t - kx = \text{const} \qquad (1.32)$$

---

* أن المجاهر الضوئية الحديثة تعطى تكبيرا يقارب ١٠٠٠ - ٢٠٠٠ مرة أما المجهر الالكترونى فيسمح بتكبير يعادل مليون مرة . وبالاضافة إلى المجهر الالكترونى يستعمل الآن المجهر البروتونى الذى يتفوق على الأول فى مجال قوة التكبير .

فإذا ازداد الزمن بمقدار Δt بحيث يتحقق الشرط السابق (1.32) فان الاحداثى يجب أن يزداد بمقدار Δx الذى يمكن حسابه من العلاقة

$$\omega (t + \Delta t) - k (x + \Delta x) = \omega t - kx$$

أى أن :

$$\omega \Delta t - k \Delta x = 0 \qquad (1.33)$$

ومن هنا نحسب سرعة انتشار طور ثابت تسمى بالسرعة الطورية أو الصفحية ، أى أن :

$$u = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\omega}{k} \qquad (1.34)$$

فللضوء ، كما للالكترونات* (انظر 1.7) نجد أن :

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{c\sqrt{p^2 + m_0^2c^2}}{\hbar}, \quad k = \frac{p}{\hbar} \qquad (1.35)$$

أى أن السرعة الطورية للفوتونات ($m_0 = 0$) تكون مساوية لسرعة الضوء :

$$u = \frac{\omega}{k} = c \qquad (1.36)$$

ولحساب السرعة الطورية ، فى حالة الالكترونات المتحركة بالسرعة v نكتب عوضا عن (1.35) ، (انظر 1.11) ، ما يلى :

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{mc^2}{\hbar}, \quad k = \frac{mv}{\hbar} \qquad (1.37)$$

وعندئذ نجد أن السرعة الطورية يجب أن تساوى :

$$u = \frac{c^2}{v} > v \qquad (1.38)$$

أى أنها أكبر من سرعة الضوء طالما أن $c > v$ وهذا يعنى أنه لا يمكن للسرعة الطورية أن تكون مناسبة لحركة أى جسيم أو لنقل أى طاقة .

* عند دراسة السرعتين الطورية والزمرية سنكتب للطاقة E العبارة النسبية وعندئذ فإن علاقتها مع الدفع p ستكون صحيحة فى حالة الالكترونات والفوتونات أيضا .

هـ) **السرعة الرزمية والرزم الموجية** . طبقا لمبدأ التراكب يجب أن يكون مجموع (أو تكامل) الحلول الخاصة $\varphi_i\,(x, t)$ (أو أى تركيب خطى لها) حلا للمعادلة الموجية ، أى أن :

$$\varphi(x, t) = \sum_i C_i \varphi_i (x, t) \qquad (1.39)$$

حيث C_i - عوامل ثابتة يمكن أن نعتبرها مساوية الواحد $(C_i = 1)$ دون الاخلال بالحالة العامة .

يطبق مبدأ التراكب على المعادلات الموجية الخطية فقط كمعادلات الالكتروديناميكا التقليدية التى تدرس انتشار الأمواج الكهرطيسية فى الفراغ أو معادلة شرودينجر التى تصف حركة الالكترونات . بينما لا يطبق المبدأ المذكور على المعادلات غير الخطية ، كمعادلة أينتشتين مثلا فى حقل الجاذبية أو معادلات الضوء غير الخطية ، أما موجات دوبرويل فتفترض خطية وبالتالى يطبق عليها مبدأ التراكب .

لنشرح الآن مفهوم السرعة الرزمية . من المعلوم أن العملية الموجية لا يمكن أن تكون وحيدة اللون تماما $(k = \text{const})$ لأنها تملك دائما عرضا ما ، فهى تتألف من زمرة الموجات المتقاربة فى أعدادها الموجية وفى تواترها . ونستطيع بواسطة هذه الزمرة أن نركب ما يسمى بالرزمة الموجية التى تختلف سعتها عن الصفر فى مجال صغير من الفراغ يمكن ربطه بموقع الجسيم . ولنحسب سرعة انتشار السعة العظمى للرزمة الموجية ، والتى تسمى بالسرعة الرزمية . وكمثال على ذلك ، تجمع الرزمة الموجية من زمرة موجات مستوية عددها الموجى محصور بين $k_0 - \frac{\Delta k}{2}$ و $k_0 + \frac{\Delta k}{2}$. ولتبسيط المسألة ، نفرض أن لكل موجة من هذه الموجات سعة ثابتة $(A/\Delta k = \text{const})$. عندئذ ، نجد طبقا لمبدأ التراكب (1.39) أن التابع (الدالة) الموجى العام يساوى مجموع هذه الموجات المستوية أو تكاملها ، أى أن :

$$\varphi(x, t) = \frac{A}{\Delta k} \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} e^{-i(\omega t - kx)}\, dk \qquad (1.40)$$

حيث يعتبر ω فى هذه المسألة تابعا للعدد الموجى k . وبابقاء التابع فى حيز التجريد ، نستطيع أن ننشر التواتر ω فى سلسلة تايلور ، أى أن :

$$\omega(k) = \omega(k_0) + (k - k_0)\,\omega'(k_0) + \frac{(k - k_0)^2}{2}\,\omega''(k_0) + \ldots \qquad (1.41)$$

أو

$$\omega(k) = \omega_0 + \omega_1 + \omega_2 + \ldots$$

وباهمال الحدود اللامتناهية فى الصغر من المرتبة الثانية وما بعد ، نجد أن :

$$\omega(k) = \omega_0 + (k - k_0)\,\omega_0' + \ldots \qquad (1.42)$$

مع العلم أن الحد المهمل الذى يعين دقة هذا النشر يساوى

$$\omega_2 = \frac{(k - k_0)^2}{2}\,\omega_0'' \sim (\Delta k)^2\,\omega_0'' \qquad (1.43)$$

وبتعويض (1.42) فى (1.40) نجد أن :

$$\varphi(x, t) = B e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \qquad (1.44)$$

بحيث يحدد المعامل B بالشكل التالى :

$$B = \frac{A}{\Delta k} \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} e^{-i(k - k_0)(\omega_0' t - x)}\, dk = A\,\frac{\sin \xi}{\xi} \qquad (1.45)$$

حيث

$$\xi = \frac{\Delta k}{2}(x - \omega_0' t) \qquad (1.46)$$

ومن هنا نجد ، أنظر (1.33) ، أن السعة B ستنتشر فى الفراغ بالسرعة التالية

$$\bar{u} = \omega_0' = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} \qquad (1.47)$$

وهى ما تسمى بالسرعة الرزمية .

وإذا استخدمنا العلاقة (1.35) نجد أن السرعة الرزمية تساوى :

$$\bar{u} = \frac{dE}{dp} \qquad (1.48)$$

وللفوتونات ($m_0 = 0$) كحالة خاصة نرى أن السرعتين الرزمية والطورية تساويان سرعة الضوء فى الخلاء ، أى أن :

$$\bar{u} = u = c \qquad (1.49)$$

أما بالنسبة للموجات الدوبرويلية ، فبعد أن نأخذ بعين الاعتبار (1.37) ، نجد أن :

$$\bar{u} = \frac{c^2 p}{E} = v \qquad (1.50)$$

أى أن السرعة الرزمية تتطابق مع سرعة الجسيم . ولندرس الآن التوزّع الفراغى للرزمة الموجية ، مفترضين أن $t = 0$ ، فنجد طبقا لـ (1.46) أن :

$$\xi = \frac{\Delta k}{2} x \qquad (1.51)$$

وأن مربع سعة الرزمة الموجية يساوى :

$$B^2 = A^2 \frac{\sin^2 \xi}{\xi^2} \qquad (1.52)$$

وأن قيمته الرئيسية العظمى هى فى النقطة $\xi = 0$ أى أن :

$$B^2(0) = A^2 \qquad (1.53)$$

أما النهايات العظمى الباقية لـ B^2 (عندما $\xi = \pm \frac{3\pi}{2}$ ؛ $\pm \frac{5\pi}{2}$ . . .) فستصغر بحدة ، أى أن :

$$B^2\left(\pm \frac{3\pi}{2}\right) = \frac{4}{9\pi^2} A^2 \sim \frac{1}{20} A^2$$

$$B^2\left(\pm \frac{5\pi}{2}\right) = \frac{4}{25\pi^2} A^2 \sim \frac{1}{60} A^2$$

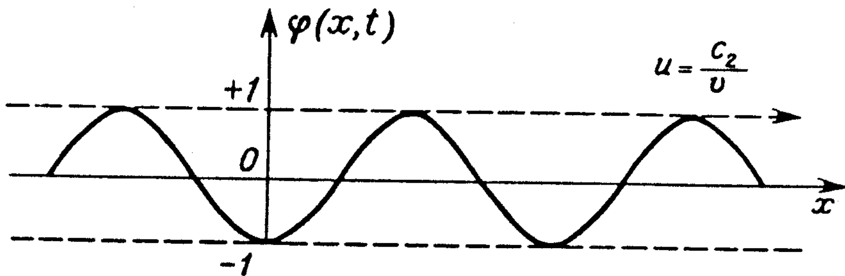
وتنعدم السعة فى النقاط ($\xi = \pm\pi, \pm 2\pi$) . فإذا أخذنا كل ذلك بعين الاعتبار ، نجد أن منطقة تمركز الجزء الأساسى للرزمة الموجية Δx تقع بجوار النهاية الرئيسية العظمى ولا تكون هذه المنطقة عمليا ، أصغر من نصف البعد بين الصفرين الأوليين للدالة $\xi(\pm\pi)$ أى أن $\Delta\xi = \pi$. وعندئذ نجد ، طبقا لـ (1.51) ، أن :

$$\frac{\Delta k \cdot \Delta x}{2} \geqslant \pi \qquad (1.54)$$

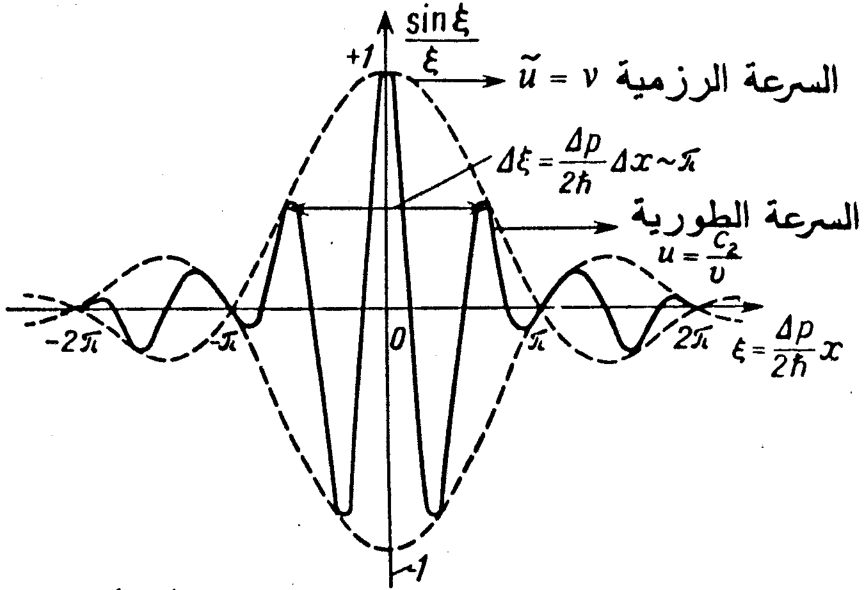
ويعنى ذلك أن عرض الرزمة الموجية مرتبط بمجال الأعداد Δx الموجية Δk بالعلاقة التالية :

$$\Delta k \cdot \Delta x \geqslant 2\pi \qquad (1.55)$$

ولزيادة الايضاح نرسم الخط البيانى للأمواج الدوبرويلية ، عندما $t = 0$ ، للموجة وحيدة اللون (الشكل ١ - ٢) ثم لزمرة من الموجات (الرزمية الموجية) (الشكل ١ - ٣) . لقد اعتبرنا للتسهيل أن $A = 1$. وبما أنه للموجة وحيدة اللون $\Delta k = 0, \frac{\sin\xi}{\xi} = 1$ ، انظر الشكل ١ - ٢ ، لذا اعتبرنا محور الفواصل هو المحور x . أما السرعة الطورية فتساوى u . وأما للرزمة الموجية فقد اعتبرنا محور الفواصل هو المحور ξ ورسمنا السعة $\left(\xi = \frac{\Delta k}{2} x\right)$ $\frac{\sin\xi}{\xi}$ بخط متقطع والتابع (الدالة) الموجى بخط متصل . ومنه يتبين أن التابع الموجى متمركز ضمن النهاية الرئيسية



الشكل ١ - ٢ . شكل الموجة وحيدة اللون عندما $t = 0$. السعة مبينة بخط متقطع والموجة بخط متصل .



الشكل ١ ـ ٣ . شكل الرزمة الموجية عندما $t = 0$ للموجات الدوبرويلية $\left(\Delta k = \frac{\Delta p}{\hbar}\right)$. السعة $\frac{\sin\xi}{\xi}$ مبينة بخط متقطع والموجة بخط متصل .

العظمى $(\Delta\xi \sim \pi)$ وينتشر بالسرعة الطورية $u = \frac{c^2}{v}$ وسعته بالسرعة الرزمية $\tilde{u} = v$.

وبنفس الطريقة يمكننا أن ندرس التمركز المؤقت للرزمة الموجية ، فإذا فرضنا ، فى (1.46) أن $x = 0$ ، نجد أن :

$$\xi = -\frac{\Delta k}{2}\frac{d\omega}{dk}t = -\frac{\Delta\omega}{2}t \qquad (1.56)$$

وبدراسة شبيهة بالسابقة ، نحصل من (1.56) على العلاقة التالية :

$$\Delta\omega \cdot \Delta t \geqslant 2\pi \qquad (1.57)$$

ان العلاقتين (1.54) و (1.57) صحيحتان لجميع الظواهر الموجية (الخطية) فالعلاقة (1.57) المعروفة جيدا فى علم الضوء تربط عرض الخط الطيفى بمدة الاشعاع . ان الحد ذا الدرجة الثانية من الصغر ، انظر (1.43) ، المهمل فى عملية النشر (1.41) يحدد زمن غموض الرزمة الموجية ؛ لأنه عندما يصبح المقدار $\omega_2 t$ من الرتبة $W_2\pi$ فان النشر الخطى

(1.42) الذى يدخل ضمن sin ξ يفقد معناه . فإذا تشكلت الرزمة الموجية فى اللحظة 0 = t ، عندئذ يكون $t = \Delta t$ ، حيث أن المقدار Δt هو زمن الغموض المعنى ، وعليه نجد من (1.43) أن :

$$(\Delta k)^2 \frac{d^2\omega}{dk^2} \Delta t \sim 2\pi$$

أى أن :

$$\Delta t \sim \frac{2\pi}{(\Delta k)^2 \frac{d^2\omega}{dk^2}} \qquad (1.58)$$

أما إذا استعملنا العلاقة (1.55) فنجد أن :

$$\Delta t \sim \frac{(\Delta x)^2}{2\pi \frac{d^2\omega}{dk^2}} \qquad (1.59)$$

وعليه نستطيع بواسطة المعادلة (1.35) أن نكتب المعادلات (1.55) ، (1.57) ، (1.59) ، التى تحققها أمواج دوبرويل لحزمة من الألكترونات ، بشكل آخر أى أن :

$$\Delta p \cdot \Delta x \gtrsim h \qquad (1.60)$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \gtrsim h \qquad (1.61)$$

$$\Delta t \sim \frac{(\Delta x)^2}{2\pi\hbar \frac{d^2E}{dp^2}} \qquad (1.62)$$

تسمى العلاقة (1.60) بعلاقة هايزينبيرج للاتعيين التى تبين أنه كلما كانت Δp أضيق كانت Δx أوسع . وعندما تكون الموجة مستوية $\Delta p \to 0$ نجد أن $\Delta x \to \infty$ ، انظر الشكل (1.2) ، إذ لا تتغير السعة فى كل نقاط الفراغ ؛ أى أنه يوجد نفس الاحتمال لموقع الجسيم فى كل الفراغ (حالة البعد الواحد) . ومن السهل تعميم العلاقة (1.60) على حالة الفراغ ثلاثى الأبعاد ، وعندئذ ستكون صحيحة لا للاحداثى x فحسب بل وللاحداثيين y و z أيضا (ثلاث علاقات) . وفيما يلى ، سنستخلص علاقات اللاتعيين بدقة أعلى . لقد سميت العلاقة (1.61) بعلاقة اللاتعيين الرابعة . لندرس

أخيرا زمن غموض الرزمة الموجية المعيّن بالمساواة (1.62) ، ففى الحالة الخاصة أى للفوتونات $E = cp$ ، لذا $\frac{d^2E}{dp^2} = 0$ وعليه فإن زمن غموض الرزمةالموجية يسعى إلى اللانهاية ($\Delta t \to \infty$) أى أن الرزمة الموجية فى الحقيقة غير غامضة . أما من أجل الموجات الدوبرويلية ، أى للجسيمات التى لا تنعدم كتلتها الساكنة فنجد من (1.35) أن :

$$\frac{dE}{dp} = \frac{c^2p}{E} = \frac{c^2p}{mc^2} = \frac{p}{m}$$

واذا اقتصرنا على الحالة النسبية $(m = m_0)$ ، نجد أن :

$$\frac{d^2E}{dp^2} = \frac{1}{m_0} \qquad (1.63)$$

وعندئذ نجد أن زمن غموض الرزمة الموجية يساوى :

$$\Delta t \sim \frac{m_0}{h}(\Delta x)^2 \qquad (1.64)$$

وعندما يكون الجسيم مرئيا (مجهريا) وكتلته 1g مثلا وبعده حوالى $\Delta x \sim 0,1$ cm ، نجد أن زمن الغموض سيكون كبيرا جدا ، أى أن :

$$\Delta t \sim 10^{25}\ \text{s} \qquad (1.65)$$

أما للألكترون ذى الكتلة $\Delta x \sim 10^{-8}$cm $m_0 \sim 10^{-27}$g (أبعاد الذرة) فان الرزمة الموجية عمليا تغمض بشكل مفاجىء لأن :

$$\Delta t \sim 10^{-17}\ \text{s} \qquad (1.66)$$

ولذلك لا بد لنا عند دراسة الالكترون فى الذرة من استعمال المعادلة الموجية . وتؤكد كل الظواهر ، التى مرّ ذكرها سابقا ، على الخواص الموجية للالكترونات .

بعد أن درسنا الناحية الكيفية للعلاقة بين الخواص الجسيمية والموجية للالكترونات ننتقل الآن إلى ايجاد المعادلات الدقيقة لوصف الخواص الموجية لها . وسندرس فى البنود اللاحقة من هذا القسم معادلة شرودينجر الموجية التى يمكن بواسطتها دراسة حركة الالكترونات عند السرعات اللانسبية .

البند ٢ ـ معادلة شرودينجر

أ) **معادلة هاملتون ـ جاكوبى** . من المعلوم فى الميكانيكا التقليدية أنه يمكن دراسة حركة جسيم باختيار تابع (دالة) هاملتون $H = H(r, p, t)$ وحل المعادلات القياسية المناسبة باعتماد الشروط الابتدائية . وإذا كان H مستقلا عن الزمن ، أى $\partial H/\partial t = 0$ فان المعادلات القياسية تملك تكاملا يسمى بتكامل الطاقة :

$$H = E \qquad (2.1)$$

حيث E ـ طاقة الجسيم ، أما تابع هاملتون فبتواجد الطاقة الكامنة $V(r)$ يساوى :

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V(r) \qquad (2.2)$$

(p ـ اندفاع الجسيم ، m_0 ـ كتلته) . ويقابل التابع (2.2) الحالة اللا نسبية ، أى عندما تكون سرعة الجسيم $\vartheta = p/m_0$ أصغر بكثير من سرعة الضوء ($v \ll c$) . ومن جهة أخرى يمكن استعمال معادلة هاملتون ـ جاكوبى لدراسة حركة الجسيم ، وذلك بدراسة تابع وضعه النهائى فى المكان r والزمان t ، أى أن :

$$S(r, t) = \int_0^t L\, dt \qquad (2.3)$$

حيث $L = L(r, v, t)$ ـ تابع لاغرانج للجسيم $(L = vp - H)$. وعندئذ تحدّد المشتقات الجزئية للتابع $S(r,t)$ المعرف سابقا ، بالشكل التالى :

$$\nabla S = p \qquad (2.4)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H \qquad (2.5)$$

وبالتعويض فى تابع هاملتون (2.2) قيمة الاندفاع من (2.4) نجد أن (2.5)

تصبح على النحو التالى :

$$-\frac{\partial S(r,\ t)}{\partial t}=\frac{1}{2m_0}(\nabla S(r,\ t))^2+V \qquad (2.6)$$

وتسمى هذه المعادلة التفاضلية من أجل S ، بمعادلة هاملتون ـ جاكوبى .

فى الحالة الخاصة : عندما تكون الطاقة V مستقلة عن الزمن يكون للمعادلة (2.6) حل من الشكل الآتى :

$$S(r,\ t)=-Et+S(r) \qquad (2.7)$$

وبتعويض $S(r,t)$ من المعادلة (2.6) نستخلص من أجل تعيين التابع $S(r)$ المعادلة التالية :

$$E=\frac{1}{2m_0}(\nabla S(r))^2+V(r) \qquad (2.8)$$

التى تسمى معادلة هاملتون ـ جاكوبى المستقرة .

ب) المعادلة الموجية للالكترونات . لكى ندرس الخواص الموجية للالكترونات ، التى تتسم بطول الموجة الدوبرويلية λ ، يجب أن نعمم معادلة هاملتون ـ جاكوبى معتمدين على معادلة شرودينجر . رغم ذلك يبقى استنتاج المعادلة السابقة غير دقيق ، لذا يجب اعتبارها بديهية :

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\psi+V\psi \qquad (2.9)$$

حيث ψ ـ التابع الموجى الذى سنوضح معناه الفيزيائى فيما بعد . أما المعادلة المرافقة عقديا لمعادلة شرودينجر فهى :

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\psi^*+V\psi^* \qquad (2.10)$$

ويجب أن تحقق معادلة شرودينجر عدة شروط حدية فهى قبل كل شىء يجب أن تتحول إلى معادلة هاملتون ـ جاكوبى عندما $\hbar\to 0$ ، وهذا يعنى اختفاء الخواص الموجية للالكترونات ويمكن التحقق من ذلك إذا بدلنا التابع الموجى ψ بالتابع S عن طريق العلاقة

$$\psi(r,\ t)=Ae^{(i/\hbar)S(r,t)} \qquad (2.11)$$

وإذا أخذنا بعين الاعتبار المعادلات التالية :

$$\nabla\psi = \frac{i}{\hbar}(\nabla S)\psi$$
$$\nabla^2\psi = -\frac{1}{\hbar^2}(\nabla S)^2\psi + \frac{i}{\hbar}(\nabla^2 S)\psi \qquad (2.12)$$
$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)\psi$$

نستطيع أن نحوّل (2.9) إلى شكل آخر . وبما أن التابع ψ سيدخل فى جميع الحدود عند اجراء التحويل السابق كمضروب فقط لذا يمكن اختصاره ، وعليه نجد أن :

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m_0}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m_0}\nabla^2 S + V \qquad (2.13)$$

وإذا اعتبرنا فى المعادلة الأخيرة أن $\hbar \to 0$ ، نحصل على معادلة هاملتون - جاكوبى (2.6) . ان المعادلة (2.13) مكافئة تماما لمعادلة شرودينجر وإذا استطعنا حل المعادلة (2.13) بدقة ، سنجد التابع الموجى أيضا . ولندرس الآن حالة حدية ثانية مبنية على أساس المعادلة (2.9) ألا هى حالة الحركة الحرة ، فمن الممكن ايجاد حل دقيق للمعادلة (2.9) إذا انعدمت الطاقة الكامنة $(V = 0)$ لذا فان التابع الموجى فى هذه الحالة يساوى :

$$\psi = Ae^{-(i/\hbar)(Et - pr)} \qquad (2.14)$$

وإذا بدلنا (2.14) فى (2.9) فإننا بذلك نستخلص العلاقة التقليدية المعروفة بين طاقة الجسيم ودفعه فى حالة انعدام القوى الخارجية :

$$E = \frac{p^2}{2m_0} \qquad (2.15)$$

وعندما نوجه المحور x باتجاه الدفع p نحصل على العلاقة التالية :

$$\psi = Ae^{-(i/\hbar)(Et - px)}$$

وإذا لاحظنا أن الموجة المستوية توصف بالعلاقة الآتية :

$$\psi = Ae^{-i(\omega t - kx)} = Ae^{-2\pi i\left(\nu t - \frac{x}{\lambda}\right)} \qquad (2.16)$$

فسنجد بالمقارنة أن :

$$E = \hbar\omega = h\nu, \quad p = \hbar k$$

ومنه نحصل ، من أجل الحركة الأحادية البعد ، على طول موجة دوبرويل المعروفة :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_0 v} \qquad (2.17)$$

ان الانتقال من معادلة شرودينجر إلى معادلة هاملتون - جاكوبى يكافىء فى علم الضوء الانتقال من المعادلة الموجية إلى المعادلة الشعاعية (الضوء الهندسى) . ونرى مما سبق أن معادلة الموجة للفوتونات تحوى على المشتقة الثانية بالنسبة للزمن ، أما فى معادلة شرودينجر فلا توجد سوى المشتقة الأولى بالنسبة للزمن . وسبب ذلك هو أن الأخيرة تصف حركة الجسيمات اللانسبية ، أما الفوتونات فتعتبر جسيمات نسبية دائما . وعندما ننطلق من العلاقات النسبية بين الطاقة والدفع ، انظر (1.7) ، نرى أن المعادلة الموجية تأخذ شكلا آخر (الجسيم الحر) :

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{c^2 \partial t^2} = -\hbar^2 \nabla^2 \psi + \hbar^2 m_0^2 c^2 \psi$$

فإذا فرضنا أن $m_0 = 0$ نحصل على المعادلة الموجية للفوتونات ، كما نحصل على معادلة شرودينجر إذا فرضنا أن $E^{rel} = E + m_0 c^2$ و $p \ll m_0 c$ ، أى يمكن اهمال الحدود اللامتناهية فى الصغر من المرتبة الثانية $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ وهكذا ، تحقق معادلة شرودينجر الشروط الحدية الضرورية ، $\hbar = 0$ ، أى عندما نستطيع اهمال طول موجة دوبرويل ، وتتحول عندئذ إلى معادلة هاملتون - جاكوبى . أما الحركة الحرة للالكترونات فهى حركة موجية يتعين طول موجتها بعلاقة دوبرويل . وأما إذا كانت الطاقة الكامنة لا تتعلق بالزمن ، فنستطيع أن نجرى فى معادلة شرودينجر التحويل التالى :

$$\psi(r, t) = e^{-(i/\hbar)Et}\psi(r) \qquad (2.18)$$

وعندئذ يخضع التابع الموجى $\psi(r)$ لمعادلة شرودينجر المستقرة التالية :

$$E\psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\psi(r) + V\psi(r) \qquad (2.19)$$

التى تتحول إلى معادلة هاملتون - جاكوبى المستقرة عندما $\hbar \to 0$ ، انظر (2.8) .

جـ) المعنى الفيزيائى للتابع الموجى ψ . لكى نبين المعنى الفيزيائى للتابع الموجى ψ ، أو بتعبير أوضح ، لكى نفهم مدلوله أو ما يقصد به ، **نحسب كثافة الشحنة ρ وغزارة التيار j المرتبطين ببعضهما البعض بمعادلة الاستمرارية* التالية :**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0 \qquad (2.20)$$

نضرب معادلتى شرودينجر (2.9) و (2.10) بالتابعين الموجيين ψ^* و ψ على الترتيب ثم نطرح احداهما من الأخرى فنجد :

$$\frac{\partial \psi^*\psi}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m_0}\nabla(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) = 0 \qquad (2.21)$$

حيث يكون ψ تابعا للاحداثيين r و t . لنكتب المعادلة (2.21) بالشكل التالى :

$$\frac{\partial \psi^*\psi}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m_0}\operatorname{div}(\psi \operatorname{grad}\psi^* - \psi^* \operatorname{grad}\psi) = 0 \qquad (2.22)$$

وإذا ضربنا (2.22) بعنصر الحجم d^3x وكاملناها فى كل نقاط الفراغ نجد أن :

---

* تعبّر معادلة الاستمرارية عن قانون مصونية الشحنة . فإذا ضربنا (2.20) بـ d^3x وكاملنا الناتج بالنسبة للفراغ كله نجد أن :

$$\frac{d}{dt}\int \rho\, d^3x = -\int \operatorname{div} j\, d^3x = -\oint_S (j\, dS)$$

حيث يمتد السطح S إلى اللانهاية حتى يحيط بالحجم كله . وإذا فرضنا ان التيارات تنعدم فى اللانهاية نجد أن الشحنة الكلية تبقى ثابتة ، أى أن :

$$\int \rho\, d^3x = e = \text{const}$$

$$\frac{d}{dt}\int \psi^*\psi\, d^3x = 0 \qquad (2.23)$$

أو

$$\int \psi^*\psi\, d^3x = \text{const} \qquad (2.24)$$

وبما أن معادلة شرودينجر خطية ، لذا فإن التابع الموجى ψ يتعيّن بدقة تصل حتى معامل عددى ثابت ، يمكن اختياره بحيث يصبح التكامل (2.24) مساويا للواحد* ، أى أن :

$$\int \psi^*\psi\, d^3x = 1 \qquad (2.25)$$

وتبقى لدينا بعد ذلك أعمال أخرى ، مثلا ضرب التابع الموجى بالمضروب الطورى الذى طويلته تساوى الواحد ، أى أن :

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{i\alpha}\psi, \quad \psi^* \rightarrow \psi^{*\prime} = e^{-i\alpha}\psi^*$$

حيث α عدد حقيقى ثابت ($|e^{i\alpha}| = 1$) . وإذا بدلنا ψ بـ $\psi' = e^{i\alpha}\psi$ و ψ^* بـ $e^{-i\alpha}\psi$ ، نجد أن المساواة (2.22) تبقى صحيحة ولا تتغير قيمة التكامل (2.25) . وبمقارنة المعادلتين (2.22) و (2.20) وبفرض أن e هى شحنة الالكترون نستخلص من أجل كثافة الشحنة وغزارة التيار العلاقتين التاليتين :

$$\begin{aligned} \rho &= e\psi^*\psi \\ j &= \frac{ihe}{2m_0}(\psi\, \text{grad}\, \psi^* - \psi^*\, \text{grad}\, \psi) \end{aligned} \qquad (2.26)$$

وهكذا تحقق التراكيب التربيعية للتابعين ψ و ψ^* معادلة الاستمرارية (2.26) المعروفة فى الفيزياء التقليدية ، رغم اختلاف مدلولها فى الفيزياء التقليدية والكوانتية ، ففى الفيزياء التقليدية يمكن دراسة حركة الجسيمات طالما أن مدارها معلوم ، ولهذا نفهم ρ و j فى المعادلة (2.20) ككثافة

* المعادلة (2.25) صحيحة من أجل الطيف المتقطع عندما ينعدم التابع الموجى فى اللانهاية . أما عندما يكون الطيف مستمرًا فلا بد من وضع شروط حدية خاصة على التابع الموجى مثل تلك التى تؤدى إلى العلاقة (2.25) حتى ولو لم ينعدم التابع الموجى فى اللانهاية . وقد تتواجد معايير أخرى لمثل هذه الحالة (انظر ذلك بالتفصيل فى البند ٤) .

الجسيمات وغزارة تيار المادة على الترتيب . ولكن لا يمكن تحديد مكان الجسيم واندفاعه معا فى الفيزياء الكوانتية وبدقة فى كل لحظة من الزمن t ، ولذا يرتبط عدم التعيين هذا بعلاقات اللا تعيين (الشك) ، وعليه اقترح بورن التأويل الاحتمالى للتابع الموجى ψ الذى يصف حالة الجسيم (أو المجموعة الكوانتية فى الحالة العامة) ؛ وبناء على ذلك فإن الجداء $\psi^*(r)\psi(r)$ يمثل الكثافة الاحتمالية لوجود الجسيم فى نقطة من الفراغ محددة بمتجه الموضع r ، وهذا يعنى أن الميكانيكا الكوانتية علم يبنى على الأسس النظرية الاحتمالية حتى ولو لجسيم واحد . فإذا ضربنا المقدار $\psi^*\psi = |\psi|^2$ بـ d^3x نجد أن $|\psi|^2 d^3x$ يمثل احتمال ظهور الجسيم فى عنصر الحجم d^3x حول النقطة r . وتعنى المساواة (2.25) عندئذ أن الجسيم يجب أن يتواجد فى نقطة ما من الفراغ ولهذا فإن الاحتمال الكلى ، لوجوده فى كل نقاط الفراغ ، يساوى الواحد .

د) المؤثرات الخطية فى نظرية شرودينجر . لندخل الآن مفهوم المؤثرات الخطية التى سنكتب بواسطتها معادلة شرودينجر . قبل كل شيء يجب أن تحقق المؤثرات الخطية عند تأثيرها على تابع عادى ما $f(r)$ الخواص التالية :

$$M(f_1 + f_2) = Mf_1 + Mf_2, \quad MCf = CMf \qquad (2.27)$$

حيث C عدد ثابت . ويمكن أن نأخذ مثالا على هذه المؤثرات : عملية التفاضل* (أو عملية الضرب بتابع عادى**) .

إذا قارنا المعادلة التقليدية ، أنظر (2.1) و (2.2) ، بمعادلة شرودينجر الموجية ، انظر (2.9) ، نجد أنه عند الانتقال من المعادلة التقليدية إلى

---

* سنرمز للمؤثرات المرتبطة بالتفاضل بحروف قائمة .

** وسنرمز للتوابع العادية بحروف مائلة .

المعادلة الموجية ينبغى تبديل الطاقة E بمؤثر   الطاقة E أى أن :

$$E \rightarrow \mathrm{E} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} \qquad (2.28)$$

والدفع p بمؤثر   الدفع :

$$p \rightarrow \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla \qquad (2.29)$$

وبتعويض ذلك فى المعادلة التقليدية نجد أن :

$$\mathrm{E} = \frac{1}{2m_0}\mathbf{p}^2 + V(r) \qquad (2.30)$$

وليس للمؤثرات نفسها ، أى لرمز التفاضل فى مثالنا ، أى محتوى فيزيائى . ولذلك ، لكى يصبح للعلاقة (2.30) معنى فيزيائى يجب أن نؤثر على التابع الموجى ψ بالمؤثرات . عندئذ بدلا من (2.30) نحصل على معادلة من أجل ψ أى أن :

$$\mathrm{E}\psi = \mathrm{H}\psi \qquad (2.31)$$

حيث يعطى مؤثر تابع هاملتون بالعلاقة :

$$\mathrm{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V(r) \qquad (2.32)$$

فإذا بدلنا المؤثرات (2.28) و (2.29) بقيمتها فى (2.31) نحصل على معادلة شرودينجر (2.9) من جديد . ولنلاحظ أخيرا أن لتبديل الطاقة والدفع بالمؤثرات المقابلة لها طابع عام ، يمكن بواسطته الحصول على المعادلة الموجية فى حالة وجود الحقل المغناطيسى وكذلك فى الحالة النسبية . فمثلا نستطيع أن نحصل على المعادلة الموجية اللانسبية لجسيم شحنته e ، يقع ضمن حقل كهرطيسى كمونه المتجهى A وكمونه العددى Φ ، من معادلة شرودينجر للحالة الحرة وذلك بتبديل المؤثرين E و p بالشكل التالى : $\mathrm{E} \rightarrow \mathrm{E} - e\Phi,\ \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c}A$ وعندئذ نستخلص المعادلة المطلوبة :

$$\mathrm{E}\psi = \left[\frac{1}{2m_0}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}A\right)^2 + e\Phi\right]\psi \qquad (2.33)$$

وإذا أثرنا بمؤثر الطاقة على الموجة المستوية (2.18) المقابلة للتابع الموجى للحركة الحرة فإننا نلاحظ أن الموجة المذكورة تحقق المعادلة التالية :

$$\mathrm{E}\psi = E\psi \tag{2.34}$$

حيث E القيمة الخاصة لمؤثر الطاقة . وبنفس الطريقة نرى ، فى حالة الحركة الحرة أيضا ، أن التابع الموجى (2.18) يحقق المعادلة التالية :

$$\mathbf{p}\psi = p\psi \tag{2.35}$$

حيث p القيمة الخاصة لمؤثر الدفع . وهكذا نرى أن العلاقات المستنتجة سابقا تثبت صحة اختيار (2.28) و (2.29) كمؤثرين للطاقة والدفع .

البند ٣ ـ حل معادلة شرودينجر

أ) الحالة المستقرة . لنكتب معادلة شرودينجر المستقرة (2.19) من أجل الحالة التى لا تتعلق الطاقة الكامنة فيها بالزمن بالشكل التالى :

$$\nabla^2\psi + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - V(r))\psi = 0 \tag{3.1}$$

حيث يعبر عن الطاقة الكامنة $V(r)$ بدلالة تابع الاحداثيات . وعلينا الآن حساب الطاقة E والتابع الموجى ψ ولذلك يجب أن نضيف إلى التابع الموجى والحل ، الذى يطابق حل معادلة من الدرجة الثانية من نوع شتورم - ليوفيل ، الشروط التالية : يجب أن يكون التابع ومشتقته مستمرين ، وهذا يؤدى بدوره إلى وجوب استمرارية الشحنة وغزارة التيار ، انظر (2.26) . عدا ذلك يجب أن يكون التابع الموجى محددا ووحيد القيمة فى كل الفراغ ويحقق شروطا حدية معينة . أما فى اللا نهاية ($r \to \infty$) فيجب أن ينتهى إلى الصفر $(\psi \to 0)$ وذلك عندما يكون الطيف متقطعا ويكون $V > E$. وعليه ، نرى أن المعادلة (3.1) لا تقبل حلولا إلا من أجل قيم

معينة للوسيط الذى هو الطاقة E فى هذه الحالة ، أما قيمته المحتملة التى تسمى بالقيم الخاصة فتعيّن سويات طاقة الجملة ، أى أن :

$$E_1, E_2, E_3, \ldots, E_n, \ldots \qquad (3.2)$$

عندئذ فإن حلول المعادلة الموجية المقابلة لهذه القيم ستكون :

$$\psi_1, \psi_2, \psi_3, \ldots, \psi_n, \ldots \qquad (3.3)$$

التى تسمى بالتوابع الخاصة . أما ترقيمها n فيسمى بالأعداد الكوانتية . وترقم التوابع والقيم الخاصة بنفس الرقم الكوانتى فى حالة الحركة الأحادية البعد (مثال ذلك الحركة على المحور x) . ويتعلق التابع الموجى Ψ فى الحالة الثلاثية البعد بثلاثة أعداد كوانتية . وكذلك يمكن أن تتعلق القيم الخاصة للطاقة E بثلاثة أعداد أو بعددين أو حتى بعدد واحد فى بعض الحالات . عندئذ تكون الجملة منطبقة ، إذ تقابل قيمة واحدة للطاقة عدة توابع موجية ، وكذلك قد تعنى n ، فى الحالة العامة عدة أعداد كوانتية . وترتبط القيم الخاصة والتوابع الخاصة ، طبقا لـ (3.1) ، بالمعادلة التالية :

$$\nabla^2\psi_n + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E_n - V)\psi_n = 0 \qquad (3.4)$$

أو

$$(E_n - \mathrm{H})\psi_n = 0 \qquad (3.5)$$

حيث يتعين مؤثر هاملتون H بالعلاقة (2.32) . وان تعيين القيم الخاصة للطاقة E يعنى تكميم طيف الطاقة الذى أشار إلى أهميته بلانك لأول مرة ، انظر (1.13) . ويجرى التكميم فى نظرية بور شبه التقليدية على أساس فرضية الحالات المستقرة ، بينما نحصل على طيف الطاقة بصورة آلية تماما انطلاقا من معادلة شرودينجر . وبمعرفة طيف الطاقة نستطيع حساب تواتر الاشعاع الناتج عن الانتقال من الحالة n إلى الحالة n' ($E_{n'} < E_n$) ، فإذا

اعتبرنا الفوتون جسيما طاقته $\hbar\omega$ نستطيع أن نكتب قانون مصونية الطاقة بالشكل التالى :

$$\hbar\omega = E_n - E_{n'}$$

ومنه نجد تواتر (تردد) الاشعاع :

$$\omega = \omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} \quad (3.6)$$

ان (3.6) عبارة عن فرضية بور الثانية التى تسمى بشرط التواترات (التزددات) والتى تستخرج فى الميكانيكا الكوانتية بشكل الى اعتمادا على نظرية الأشعاع الكوانتية . ومن المهم هنا تعيين الاحتمالات الكوانتية للانتقالات أو شدة الاشعاع التى تتعلق بالقيم الخاصة للتوابع الموجية ψ_n .

ب) الحل العام . بعد حساب القيم الخاصة E_n والتوابع الخاصة ψ_n نستطيع ايجاد الحلول الخاصة لمعادلة شرودينجر (2.9) و (2.10) التى ستكون من الشكل*

$$\psi_n(r, t) = e^{-(i/\hbar) E_n t}\psi_n(r), \quad \psi_n^*(r, t) = e^{(i/\hbar) E_n t}\psi_n^*(r) \quad (3.7)$$

وبما أن معادلة شرودينجر خطية لذا يمكن تطبيق مبدأ التراكب عليها ، ذلك المبدأ الذى ينص على أن الحل العام هو مجموع ، أو بتعبير أصح ، تركيب خطى للحلول الجزئية ، أى أن :

$$\psi = \sum_n C_n e^{-(i/\hbar) E_n t}\psi_n \quad (3.8)$$

$$\psi^* = \sum_n C_n^* e^{(i/\hbar) E_n t}\psi_n^* \quad (3.9)$$

---

* بصورة عامة يجب أن يكون التابع الموجى ψ متعلقا لا بالاحداثيات r فقط وإنما بالزمن t أيضا وفى الحالة المستقرة يمكن تقسيم التابع الموجى إلى قسمين الأول فراغى يرتبط بـ r فقط والثانى زمنى يتبع t وفق قانون أسى . وعندما تكون العلاقة صريحة سنهمل المتحولات .

حيث C_n و C_n^* ـ ثابتان اختياريان . وللتأكد من صحة الحل (3.8) نعوضه فى معادلة شرودينجر (2.9) فنجد أن :

$$(E - H)\,\psi = \sum_n C_n e^{-(i/\hbar)\,E_n t}\,(E_n - H)\,\psi_n = 0$$

لقد استندنا على العلاقة (3.4) أثناء استنتاجنا للمعادلة السابقة . فإذا بدلنا (3.8) و (3.9) فى شرط المعايرة (2.25) وغيّرنا فى المعادلة (3.9) الرقم n بالرقم n' سنجد أن :

$$\sum_{n,\,n'} C_{n'}^* C_n e^{-(i/\hbar)\,t\,(E_n - E_{n'})} \int \psi_{n'}^* \psi_n \, d^3x = 1 \qquad (3.10)$$

ولكى تعمم المعادلة (3.10) على الجملة اللامنطبقة ، التى تقابل فيها كل قيمة E_n للطاقة قيمة واحدة ψ_n يجب ان تحقق التوابع الموجية الخاصة شر ط التعامد ، أى أن :

$$\int \psi_{n'}^* \psi_n \, d^3x = 0 \quad , \quad n' \neq n \qquad (3.11)$$

وان لم يتحقق ذلك ، فسيتعلق الطرف الأيسر من (3.10) بالزمن وعندئذ لن تكون هذه المعادلة صحيحة من أجل الثوابت الأختيارية C_n . وعلى ضوء المحاكمة السابقة نسطيع ، عندما $n = n'$ يكون الطرف الأيسر من (3.10) مستقلا عن الزمن ، اختيار التوابع الموجية بحيث تتحقق المعادلة التالية :

$$\int \psi_n^* \psi_n \, d^3x = 1 \qquad (3.12)$$

وبادخال دلتا ـ رمز كرونيكر ـ فايرشتراس ، التالى

$$\delta_{nn'} = \begin{cases} 1 & \text{و} \quad n = n' \\ 0 & \text{و} \quad n \neq n' \end{cases} \qquad (3.13)$$

يمكننا أن نوحد العلاقتين (3.11) و (3.12) فى علاقة واحدة تسمى بشرط التعامد والمعايرة

$$\int \psi_{n'}^* \psi_n \, d^3x = \delta_{nn'} \qquad (3.14)$$

أما فى حالة التطابق عندما تتقابل قيمة واحدة للطاقة E_n بعدة توابع موجية،على سبيل المثال بتابعين ψ'_n و ψ''_n غير متعامدين فيما بينهما ، أى أن :

$$\int \psi'^{*}_n \psi''_n d^3x = B \neq 0$$

فيمكن تشكيل تراكيب خطية (اثنين فى مثالنا) متعامدة ، مثلا عندما يكون B عددا حقيقيا سيكون لدينا التركيبان الآتيان :

$$\psi_{n1} = \frac{\psi'_n + \psi''_n}{\sqrt{2(1+B)}}, \qquad \psi_{n2} = \frac{\psi'_n - \psi''_n}{\sqrt{2(1-B)}}$$

ولهذا نستطيع دائما فى حالة التطابق اختيار التوابع الموجية بحيث يكون شرط التعامد والمعايرة من النوع التالى :

$$\int \psi^{*}_{n'm'} \psi_{nm} d^3x = \delta_{nn'} \delta_{mm'} \qquad (3.15)$$

مع العلم أن m فى مثالنا البسيط يساوى 1 و 2 . وباستخدام شرط المعايرة والتعامد (3.14) نستطيع أن نكتب (3.10) بالشكل التالى :

$$\sum_n C^{*}_n C_n = 1 \qquad (3.16)$$

وعليه ، نستطيع أن نفسر الثوابت C_n بالشكل التالى : ان مربع القيمة المطلقة $C^{*}_n C_n = |C_n|^2$ يجب أن يميز احتمال مكان الجسيم فى الحالة n . فمثلا ، عندما يكون الجسيم بالاحتمال الكامل فى الحالة الكوانتية n يمكننا أن نفترض أن $C_n = 1$ ، وأن الثوابت الأخرى $C_{n'}\ (n' \neq n)$ تساوى الصفر $(C_{n'} = 0)$. وعندئذ نجد أن للتابع الموجى حلا خاصا (3.7) ، مع العلم أنه حسب مقترحات العالم بورن (انظر البند ـ ٢ ، الفقرة ج) يجب أن يفسر المقدار

$$\psi^{*}_n \psi_n = |\psi_n|^2 \qquad (3.17)$$

ككثافة لاحتمال توزع (انتشار) الالكترون الواقع فى الحالة الكوانتية ψ_n فى الفراغ .

جـ) **الجوقات الكوانتية** . يمكننا أن نستخدم فى الميكانيكا الكوانتية مفهوم الجوقات الكوانتية وهى تلك التى تضم جملة من الجسيمات المتشابهة المنفردة (الالكترونات أو الفوتونات مثلا) التى توصف بتابع موجى واحد . فإذا فرضنا أن احتمال وجود الكترونين فى حالتين كوانتيتين n_1 و n_2 لا يساوى الصفر ، فإن التابع الموجى العام لهما يجب أن يكون تركيبا خطيا لتابعى حالتيهما ويكتب طبقا لـ (3.8) بالشكل التالى :

$$\psi = C_{n_1} e^{-(i/\hbar) E_{n_1} t} \psi_{n_1} + C_{n_2} e^{-(i/\hbar) E_{n_2} t} \psi_{n_2} \qquad (3.18)$$

والعلاقة (3.18) هى نتيجة منطقية لمبدأ التراكب الذى تخضع له معادلة شرودينجر لكونها الخطية . وعليه ، فإنه لحساب كثافة احتمال توزع الالكترون فى الفراغ نجد أن :

$$\psi^*\psi = C^*_{n_1} C_{n_1} \psi^*_{n_1} \psi_{n_1} + C^*_{n_2} C_{n_2} \psi^*_{n_2} \psi_{n_2} + C^*_{n_2} C_{n_1} e^{-(i/\hbar) t (E_{n_1} - E_{n_2})} \psi^*_{n_2} \psi_{n_1} + C^*_{n_1} C_{n_2} e^{(i/\hbar) t (E_{n_1} - E_{n_2})} \psi^*_{n_1} \psi_{n_2} \qquad (3.19)$$

وتسمى الجوقة التى توصف بتوابع موجية يمكن جمعها كما فى (3.18) بالجوقة النقية (الكوانتية) . وفى الحالة المذكورة يتناسب الحدّان المختلطان طرديا مع جداء $C^*_{n_2} C_{n_1}$ و $C^*_{n_1} C_{n_2}$ ، ونجد ان الرابطة الاحصائية بين الالكترونين المنفردين الواقعين فى حالتين كوانتيين مختلفيّن ، التى تعدّ سببا لحدوث ظاهرتى تداخل وانعطاف الأمواج الدو برويلية . ويمكن أن تتواجد الجوقات النقية المرتبطة بمبدأ التراكب فى عملية موجية ،ففى الضوء الموجى مثلا ، هى التى تشكلّ النور المرصوص أو المتماسك . وبالاضافة إلى الجوقات النقية قد نجد الجوقات المختلطة ، التى نصادفها غالبا فى النظرية التقليدية ، عند تجميع الاحتمالات وليس التوابع الموجية ، أى أن :

$$|C|^2 = |C_1|^2 + |C_2|^2 \qquad (3.20)$$

عندئذ لا تظهر رابطة احصائية بين الحالات المختلفة ولهذا يجب أن تختفى الظواهر الموجية كالتداخل والانعطاف . أما فى العمليات الموجية فإن

الجوقة المختلطة تتولد عند غياب الحدود المتناسبة مع $C_2^*C_1$ ، $C_1^*C_2$ وهذا أمر جائز عندما يتغير الطور أو فرق الصفحة بين الحالات الكوانتية المختلفة بسرعة مع الزمن . أما فى الضوء الموجى فإن وضعا مشابها لتلك الحالة ينشأ من أجل ما يسمى بالنور غير المرصوص الصادر من منبعين ضوئيين (أو عدة منابع ضوئية) مستقلين .

د) **التفسير الإحصائى للتابع الموجى** . ينتج مما سبق أن الخواص الموجية للالكترونات والفوتونات ترتبط بالتفسير الإحصائى للتابع الموجى . وليس من الصعب فهم هذا التفسير عندما يتواجد عدد كبير من الالكترونات ، إذ يمكن اعتبار المقدار $f = |\Psi|^2$ فى هذه الحالة تابعًا للتوزع الإحصائى . أما لوحة الانعطاف فتفسر كما يلى : يتساقط على البقع المضئية أكبر ما يمكن من الالكترونات وهذا يقابل النهاية الحدية العظمى للتابع f ، وعلى العكس من ذلك ، يكون احتمال حركة الالكترونات باتجاه البقع المظلمة أصغر ما يمكن .

غير أن صعوبة التفسير الإحصائى للتابع الموجى تظهر عند دراسة حركة الكترون واحد ، حيث لا تستطيع الميكانيكا الكوانتية أن تحدد بدقة الاتجاه الذى سيسير فيه الالكترون بعد مروره من ثقب الانعطاف . عندئذ ، من الخطأ أن نفترض الالكترون جسيمًا وموجة على حد سواء ، فلو كان كل الكترون موجة لا تجه جزؤه الأول فى اتجاه والجزء الثانى فى اتجاه آخر . أما فى الحقيقة ، فإن الالكترون جسيم فى غاية الصغر لم تحدد أبعاده حتى الآن . ولكن التجارب التى أجريت فى هذا المجال تدل على أن نصف القطر الالكترونى* أصغر من 10^{-16}cm . ولهذا فعندما يمر الكترون واحد

* تدل التجارب التى أجريت على الالكترونات السريعة ، التى تكون طاقتها أكبر بألف مرة من طاقة السكون ، أنه عند مرورها عبر البروتونات والنترونات يمكن تحديد أبعاد هذه الأخيرة ، إذ تبين أنها من الرتبة 10^{-13}cm ، كما يمكن معرفة توزع الشحنات العزوم المغناطيسية فى هذه الجسيمات .

عبر ثقب الانعطاف سنجد نقطة واحدة فقط على الشاشة . ولكن عند الاستمرار فى عملية تمرير الالكترونات المنفردة ، فإن النقاط المنفردة على الشاشة ستتصل مشكلة لوحة الانعطاف الشبيهة بتلك التى تشكلّت عند تمرير الكترونات كثيرة وهذا يذكرنا إلى حد ما بما يحدث عند التصويب على هدف ، حيث تعتبر إصابة كل طلقة بمثابة علامة خاضعة لقوانين الصدفة . إذا كانت العلامات كثيرة فإنها قد تسمح لنا بوضع قانون ما للتصويب والفرق بين الطلقتين المجاورتين يكمن فى اعتبار الطلقات هنا جوقة مختلطة (تقليدية) قد تكون نهايتها العظمى فى المركز (منحنى غاوس) . أما جملة الالكترونات فتعتبر جوقة نقية (كوانتية) ، ولذا نجد عوضًا عن منحنى غاوس لوحة الانعطاف المعروفة ، أى أننا نجد إلى جانب النهاية العظمى الرئيسية الموجودة فى المركز مجموعة أخرى من النهايات العظمى النسبية تتعلق المسافة بينها بأبعاد ثقب الانعطاف والطول الدوبرويلى للموجة . وسوف تتكرر اللوحة إذا بدلنا الالكترونات بالفوتونات المنفردة . وعليه ، يجب علينا الآن أن نعيد النظر فى مبدأ السببية عند دراسة حركة الجسيمات النقطية ، فإذا استطعنا فى الميكانيكا الكلاسيكية أن نتنبأ بمسار جسيم وسرعته عندما نعرف القوى المؤثرة عليه والشروط الابتدائية فإننا نستطيع فى الميكانيكا الكوانتية التنبؤ فقط باحتمال اتجاه حركة الالكترون وسرعته واندفاعه ، مع العلم أن هذا التنبؤ محدد بعلاقات اللاتعيين (الشك) ، انظر (1.60) ، أى أن :

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \gtrsim h \qquad (3.21)$$

رغم أن هذا الاستنتاج قد أثار مناقشات حامية ونذكر أن إحدى محاولات فهم « حرية » سلوك الجسيمات مبنية على ما يسمى مبدأ الاتمام (بور ، هايزينبيرج) . وطبقًا لهذا المبدأ ، يكمن سبب علاقات الشك فى

أن تأثير المراقب على الموضوع الذى يدرسه لا يمكن أن يكون معدوما . ولشرح المبدأ السابق تورد المثال التالى : لتفرض أننا نريد تعيين مكان الكترون بواسطة مجهر دقيق جدًا ، فإذا انتقل الالكترون مسافة ما من عدسه المجهر ، بحيث تتكون الزاوية φ بين الحزمتين الساقطة والمنتثرة بطول للموجة λ ، فإنه طبقا لقوانين الضوء ، يمكن قياس إحداثى الالكترون x فى اتجاه ما مواز لمستوى عدسة المجهر ، بدقة Δx تتحدد بالشكل التالى :

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \varphi} \qquad (3.22)$$

بما أن الفوتونات تملك اندفاعًا $p=\frac{h}{\lambda}$ ينتقل جزئيًا إلى الالكترون (ظاهرة كمبتون) فإن اندفاع الالكترون على المحور x سيحدد بدقه Δp_x من المرتبة التالية :

$$\Delta p_x \sim \frac{h}{\lambda} \sin \varphi \qquad (3.23)$$

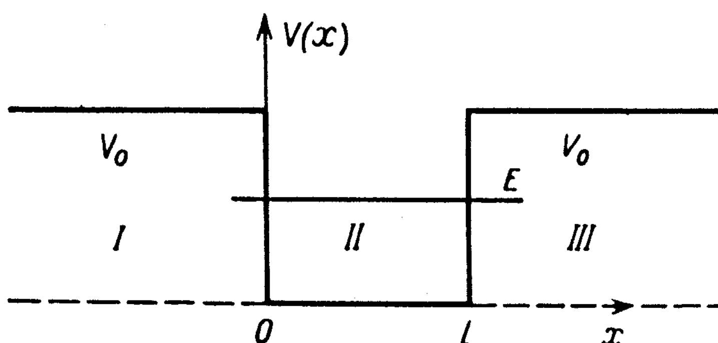
علمًا أنه إذا ضربنا Δx بـ Δp_x نحصل على علاقة الشك (3.21) . رغم ذلك ، يعتبر تفسير ظهور الطابع الاحتمالى فى نظرية حركة الالكترون بإدخال تأثير المراقب أمرًا غير مقبول ، لأنه لا يمكننا من فهم جميع استنتاجات الميكانيكا الكوانتية . فالطابع الاحتمالى فى النظرية الكوانتية (استحالة التنبؤ بنتيجة واحدة معينة فى التجارب التى تجرى على مجموعة كوانتية) يشهد فقط على حصر أو محدودية استخدام الحتمية* اللابلاسية وهذا ما يبرهن أنه طابع موضوعى . وعليه ، فإن الميكانيكا الكوانتية ، بغض النظر عن أجهزة القياس وطرائقه ، يجب أن تصف القوانين الموضوعية الأعم التى تفعل فعلها فى عالم الجسيمات الدقيقة .

* هناك مقولة مشهورة للعالم لابلاس : « اعطنى الموضع الابتدائى للكون ، وسأتنبأ لك بمستقبله » .
(المترجم)

البند ٤ ـ طيفا معادلة شرودينجر المنقطع والمستمر

أ) **الحفرة الكمونية (الجهدية)** . لنحصر دراستنا فى المسائل الأحادية البعد (الحركة تتم على المحور x فقط) ، نختار لذلك تابعًا كمونيًا يتعلق بالبعد x من أجل الحفرة الكمونية المستطيلة، انظر الشكل ٤ ـ ١ ، أو المحددة بالشكل التالى :

$$V(x) = \begin{cases} V_0 , & -\infty < x < 0 \quad (\text{المجال الأول}) \\ 0 , & 0 \leqslant x \leqslant l \quad (\text{المجال الثانى}) \\ V_0 , & l < x < \infty \quad (\text{المجال الثالث}) \end{cases} \qquad (4.1)$$



الشكل ٤ ـ ١ . حركة الجسيم فى الحفرة الكمونية .

ففى المجال II ، عندما يكون الطيف متقطعًا ينبغى أن تكون الطاقة E أصغر من الكمون V فى اللانهاية $E < V_0$ ؛ وعليه نكتب معادلة شرودينجر المستقرة (3.1) فى المجال II كما يلى :

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \qquad (4.2)$$

حيث

$$\nabla^2\psi = \frac{d^2\psi}{dx^2} = \psi'' \qquad \text{و}$$

$$k = \frac{\sqrt{2m_0E}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar} \tag{4.3}$$

عندئذ يكون الحل العام للمعادلة (4.2) (حفرة كمونية) ، أى أن :

$$\psi = A_2 \sin(kx + \delta) \tag{4.4}$$

حيث A_2 و δ - ثابتان اختياريان . أما فى المجالين I, III ، فيمكن كتابة معادلة شرودينجر بالشكل التالى :

$$\psi'' - \varkappa^2\psi = 0 \tag{4.5}$$

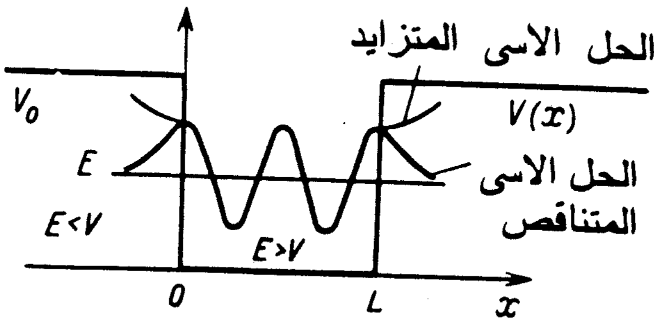
حيث :

$$\varkappa = \frac{\sqrt{2m_0(V_0 - E)}}{\hbar} = \frac{|p|}{\hbar} \tag{4.6}$$

أما حل المعادلة (4.5) (والحاجز الكمونى $V_0 > E$) فيكون من الشكل التالى :

$$\psi_{1,3} = A_{1,3}e^{\varkappa x} + B_{1,3}e^{-\varkappa x} \tag{4.7}$$

حيث $A_{1,3}$ و $B_{1,3}$ - ثابتان اختياريان . وهذا الحل يتألف من قسمين ، الأول : أسى متناقص والآخر أسى متزايد ، انظر الشكل ٤ ـ ٢ . ونحصل على القيم الخاصة لطاقة الالكترون انطلاقًا من الشروط الحدية التى تشترط



الشكل ٤ ـ ٢ . التابع الموجى عند قيمة ما لـ E ، حيث اعتبرت سوية الطاقة محورا للفواصل من أجل التابع الموجى .

أن يكون الحل المتزايد مساويًا للصفر ، لذا يجب أن نشترط أن $A_1 = A$ و $B_1 = 0$ فى المجال الأول و $B_3 = Be^{\varkappa l}$ ، $A_3 = 0$ فى المجال الثالث ، وعليه يكون لدينا :

$$\psi_1 = Ae^{\varkappa x} = Ae^{-\varkappa c} = \quad , x < 0 \tag{4.8}$$

و

$$\psi_3 = Be^{-\varkappa(x-l)} , x > l \tag{4.9}$$

فإذا دمجنا التابعين الموجبين ψ_1 و ψ_2 فى النقطة $x = 0$ والتابعين ψ_2 و ψ_3 فى النقطة $x = l$ (يعنى بالدمج تساوى التوابع الموجية ومشتقاتها فى النقطتين المذكورتين) نجد ، من أجل النقطة $x = 0$ ، أن

$$\begin{aligned} A_2 \sin \delta &= A \\ A_2 k \cos \delta &= \varkappa A \end{aligned} \tag{4.10}$$

ومنه :

$$\operatorname{tg} \delta = \frac{k}{\varkappa} \tag{4.11}$$

وبالطريقة نفسها نجد ، من أجل النقطة $x = l$ ، أن :

$$\operatorname{tg}(kl + \delta) = -\frac{k}{\varkappa} \tag{4.12}$$

وبناء على (4.11) و (4.12) نستخلص أن :

$$\sin \delta = \frac{k}{\varkappa_0} \quad , \quad \sin(kl + \delta) = -\frac{k}{\varkappa_0} \tag{4.13}$$

حيث

$$\varkappa_0 = \sqrt{2m_0 V_0} / \hbar$$

أى أن :

$$\varkappa = \sqrt{\varkappa_0^2 - k^2}$$

وبحذف المقدار δ من المعادلتين (4.13) نحصل لحساب القيم الخاصة على المعادلة التالية :

$$kl = n\pi - 2\arcsin\frac{k}{\varkappa_0} \qquad (4.14)$$

حيث $n = 1,2,3,...$ - أعداد صحيحة موجبة . وبما أن $k > 0$ ، انظر (4.3) ، و $\frac{k}{\varkappa_0} = \sqrt{\frac{E}{V_0}} < 1$ ، لذا يمكننا دائمًا (باعتبار n - عدد صحيح) أن نعتبر الزاوية $\arcsin\frac{k}{\varkappa_0}$ محصورة بين 0 و $\frac{\pi}{2}$. أما فى الحالة العامة فتحل المعادلة (4.14) بيانيًا . ولندرس بالتفصيل الحالة* $V_0 \gg E$ ، عندما تكون الحفرة الكمونية محدّدة بجدارين عاليين ($\frac{k}{\varkappa_0} = 0$) ، وعندئذ نجد من (4.14) أن :

$$k = \frac{\pi n}{l} \qquad (4.15)$$

ومنه نحسب E_n (القيم الخاصة) والتوابع المقابلة (التوابع الخاصة)

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2m_0 l^2} \qquad (4.16)$$

$$\psi_n = A_n \sin \pi n \frac{x}{l} . \qquad (4.17)$$

وفقًا لـ (4.13) ينعدم الطور δ فى هذه الحالة أما المعادلة من أجل التابع الموجى (4.17) داخل الحفرة $0 \leq x \leq l$ فستكون صحيحة ، وأما ψ_n فيساوى الصفر فى حدود الحاجز الكمونى $(\varkappa \to \infty)$. ولحساب A_n نستخدم شرط المعايرة :

$$\int_0^l \psi_n^2\, dx = A_n^2 \int_0^l \sin^2 \pi n \frac{x}{l}\, dx = \frac{l}{2} A_n^2 = 1 \qquad (4.18)$$

ومنه نستخلص التوابع الخاصة :

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \pi n \frac{x}{l} \qquad (4.19)$$

* سندرس الحالة $V_0 < E$ فى مثال أبسط ، عندما يكون طيف الطاقة مستمرا .

التى تحقق شروط المعايرة والتعامد :

$$\int_0^l \psi_{n'}\psi_n \, dx = 0 \qquad (n' \neq m) \qquad (4.20)$$

وليس من الصعب التأكد من ذلك بتبديل $\psi_{n'}$ ، ψ_n بقيمتهما من (4.19) . ولنكتب الآن الشكل النهائى للقيم الخاصة E_n والتوابع الموجية ψ_n المقابلة لأصغر الأعداد الكوانتية $n = 1,2,3$ ، أى أن :

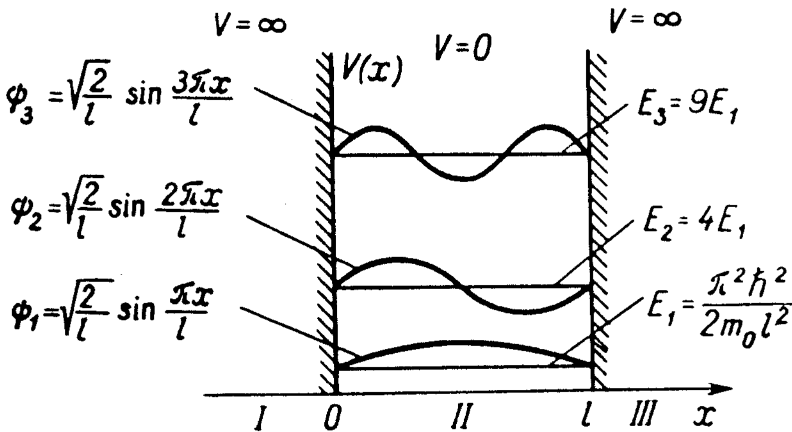
$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0 l^2}, \quad \psi_1 = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{\pi x}{l} \qquad (n = 1)$$

$$E_2 = 4E_1, \quad \psi_2 = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{2\pi x}{l} \qquad (n = 2) \qquad (4.21)$$

$$E_3 = 9E_1, \quad \psi_3 = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{3\pi x}{l} \qquad (n = 3)$$

وقد مثلت هذه الحلول بيانيًا على الشكل ٤ ـ ٣ وهى تشبه كثيرًا حلول اهتزازات الوتر التى تشكل أمواجًا مستقرة . إذ تقابل الحالة $n = 1$ النغمة الأساسية والحالة $n = 2$ — الإيقاع الأول ، إلى آخره .

لنحسب أخيرًا كثافة الشحنة وغزارة التيار عند حركة الجسيمات فى الحفرة الكمونية ، نلاحظ قبل كل شىء أن غزارة التيار وفقًا لـ (2.26)



الشكل ٤ ـ ٣ . الجسيم فى حفرة كمونية جداراها عاليان إلى ما لا نهاية .

تساوى الصفر عندما تكون التوابع حقيقية $(j_x = 0)$. وهذه نتيجة طبيعية ، لأن الاهتزازات السابقة تمثل أمواجًا مستقرة لا تشكل تدفقات من الجسيمات . ونحسب كثافة الشحنة بالعلاقة (2.26) فنجد أن القيم :

$$\rho = \frac{2e}{l} \sin^2 \frac{n\pi x}{l} \tag{4.22}$$

التى هى بطون الاهتزازات $\left(\rho = \frac{2e}{l}\right)$ وعقدها $(\rho = 0)$. فمثلا عندما $n = 1$ نجد بطنًا واحدًا فى النقطة $x = \frac{l}{2}$ ، أى فى الوسط ، وبصورة عامة يحدد العدد n عدد البطون .

ب) **الطيف المستمر** . نقتصر دراستنا للطيف المستمر فى حالة حركة الجسيم الحرة ، إذ يمكن كتابة معادلة شرودينجر ، فى أبسط حالات الحركة أحادية البعد حيث تنعدم الطاقة الكامنة $(V = 0)$ فى المجال $(-\infty < x < \infty)$ x كله بالشكل التالى :

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \tag{4.23}$$

حيث

$$k = \frac{p}{h} \tag{4.24}$$

ويكون حلها بالشكل التالى :

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{4.25}$$

ومنه نلاحظ أن الحل الأول $Ae^{-i(\omega t - kx)}$ يصف حركة الموجة فى اتجاه واحد من x وأما الثانى $Be^{-i(\omega t + kx)}$ فيصفها بالاتجاه المعاكس ؛ وبما أن العدد الموجى k يأخذ قيمًا موجبة وسالبة على حد سواء ، لذا يمكن لأحد الحلين أن يصف الحالتين معًا . فإذا اقتصرنا على دراسة حركة موجة واحدة

منتشرة بامتداد المحور x ، أو بعكسه ، فإنه يمكن كتابة الجزء المستقر من التابع الموجى بالشكل التالى :

$$\psi = Ae^{ikx} \qquad (4.26)$$

عندئذ ، من السهل التأكد من تباعد التكامل التالى :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi d^3x \rightarrow \infty$$

لذا يجب إعادة النظر فى القاعدة النموذجية ، انظر (2.25) . وثمة طريقتان لمعايرة التوابع الموجية هما طريقة بورن وطريقة استخدام تابع ديراك δ .

جـ) طريقة بورن . وتعتمد على تبديل الشروط الحدّية المضافة للتابع الموجى بشرط الدورية . ففى الحالة أحادية البعد مثلا ، بإدخال طول دورية بورن L الذى قد يكون لانهائيًا عند الضرورة $(L \rightarrow \infty)$ طالما أنه يحذف من النتيجة النهائية ، نستطيع أن نضيف إلى التابع الموجى شرط الدورية التالى :

$$\psi(x) = \psi(x + L) \qquad (4.27)$$

أو

$$Ae^{ikx} = Ae^{ik(x+L)}$$

ومنه نجد أن :

$$e^{ikL} = 1 \qquad (4.28)$$

أى أن

$$k = \frac{2\pi n}{L} = \frac{p}{\hbar} \qquad (4.29)$$

حيث يمكن للعدد الكوانتى n أن يأخذ قيمًا موجبة وسالبة بما فيها الصفر أى أن :

$$n = 0, \quad \pm 1, \quad \pm 2, \quad \pm 3, \; \ldots \qquad (4.30)$$

وعندئذ نحصل من (4.24) على طيف الطاقة (الحركة الحرة)

$$E_n = \frac{p^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = \frac{2\pi^2\hbar^2 n^2}{m_0 L^2} \tag{4.31}$$

فإذا فرضنا أن الجسيم يقع فى المجال $-\frac{L}{2} \leqslant x \leqslant \frac{L}{2}$ فإننا نجد من شرط المعايرة أن :

$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi^* \psi d^3x = 1 \tag{4.32}$$

ومنه

$$A = \frac{1}{\sqrt{L}}$$

ولهذا يكتب التابع الموجى المعاير بالشكل التالى :

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{2\pi n}{L}x} \tag{4.33}$$

ومن السهل البرهان أن التوابع الموجية لا تحقق شرط المعايرة فقط وإنما شرط التعامد أيضًا ، وليس من الصعب التأكد من ذلك مباشرة بحساب التكامل التالى :

$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi_{n'}^* \psi_n \, dx = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} e^{i\frac{2\pi}{L}(n-n')x} dx = \frac{\sin \pi (n-n')}{\pi (n-n')} = \delta_{nn'} \tag{4.34}$$

وهكذا استطعنا بواسطة المفهوم المذكور (طول الدورية) أن نجعل من الطيف المستمر طيفًا متقطعًا ، الذى يتحوّل من جديد إلى طيف مستمر عندما ينتهى L ، الذى ليس له معنى فيزيائى ، إلى اللانهاية . وفى الحقيقة نجد من (4.31) عند حساب ΔE بين سويتين متجاورتين أن :

$$\Delta E = \frac{2\pi^2\hbar^2 2n}{m_0 L^2} \Delta n. \tag{4.35}$$

فإذا اعتبرنا أن $\Delta n = 1$ و $p = m_0 v = \frac{2\pi\hbar n}{L}$ نجد أن :

$$\Delta E = \frac{2\pi\hbar}{L} v \tag{4.36}$$

ومنه نجد أنه عندما $L \to \infty$ فإن $\Delta E \to 0$ أى أن طيف الطاقة سيكون مستمرًا . ولنعمم هذه المسألة على حركة الجسيم الحرة والثلاثية الأبعاد ، وعندئذ تأخذ معادلة شرودينجر الشكل التالى :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}+k^2\right)\psi=0 \qquad (4.37)$$

حيث

$$k^2=\frac{2m_0}{\hbar^2}E \qquad (4.38)$$

فإذا طبقنا على التابع الموجى شرط الدورية من أجل المحاور الاحداثية الثلاثة ، نجد أن :

$$\begin{aligned}\psi(x,y,z)&=\psi(x+L,y,z)\\ \psi(x,y,z)&=\psi(x,y+L,z)\\ \psi(x,y,z)&=\psi(x,y,z+L)\end{aligned} \qquad (4.39)$$

وعليه ، يكون الحل العام :

$$\psi(r)=\frac{1}{L^{3/2}}e^{i(kr)} \qquad (4.40)$$

حيث

$$k_x=k_1=\frac{2\pi n_1}{L},\quad k_2=\frac{2\pi n_2}{L},\quad k_3=\frac{2\pi n_3}{L} \qquad (4.41)$$

ويمكن أن تكون كل من n_1, n_2, n_3 أعدادًا صحيحة موجبة أو سالبة بما فيها الصفر ، كما يحقق الحل الناتج شرط التعامد والمعايرة ($d^3x = dx\,dy\,dz$) ، وعليه يكون لدينا :

$$\int \psi^*_{n_1'n_2'n_3'}\psi_{n_1n_2n_3}d^3x=\delta_{n_1n_1'}\delta_{n_2n_2'}\delta_{n_3n_3'} \qquad (4.42)$$

وعندئذ يساوى التابع الموجى المتعلق بالاحداثيات والزمن ما يلى :

$$\psi=\frac{1}{L^{3/2}}e^{-(i/\hbar)(Et-pr)} \qquad (4.43)$$

حيث

$$p = \hbar k, \quad E = \frac{p^2}{2m_0} = \frac{2\pi^2\hbar^2}{m_0 L^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \qquad (4.44)$$

د) **طريقة دلتا ـ تابع ديراك** . من الضرورى التوقف عند أهم خواص التابع دلتا قبل أن نشرح طريقة المعايرة بواسطته ، فهو يمثل تعميمًا لرمز كرونيكر ـ فايرشتراس على التوابع المستمرة . ولنفترض أننا ننشر التابع $f(x)$ فى جملة كاملة من التوابع المتعامدة والمعايرة $\psi_n(x)$

$$f(x) = \sum_n f_n \psi_n(x) \qquad (4.45)$$

حيث تخضع التوابع $\psi_n(x)$ لشرط التعامد والمعايرة :

$$\int \psi_{n'}^*(x)\, \psi_n(x)\, dx = \delta_{nn'} \qquad (4.46)$$

الذى يمثل متجهات الوحدة فى الفراغ اللانهائى البعد المسمى بفراغ هيلبرت . ونذكر ، فى هذا السياق أن التوابع الخاصة لمعادلة شرودينجر تخضع للعلاقة (4.46) . لنضرب (4.45) بـ $\psi_{n'}^*(x)$ وبعد إجراء عملية التكامل فى كل الفراغ نستخلص معاملات فورييه المعممة f_n :

$$f_n = \int f(x')\, \psi_n^*(x')\, dx' \qquad (4.47)$$

ثم نعوض (4.47) فى (4.45) فنجد أن :

$$f(x) = \sum_n \int dx'\, f(x')\, \psi_n^*(x')\, \psi_n(x) \qquad (4.48)$$

ويجب أولا إجراء التكامل بالنسبة لـ dx' ثم حساب المجموع وفق n

$$\sum_n \psi_n^*(x')\, \psi_n(x) \qquad (4.49)$$

بسبب تباعده ولكن إذا أدخلنا مضروبًا « قاطعًا » مثل $e^{-\alpha|n|}$ $(\alpha \geqslant 0)$ بحيث يتقارب المجموع :

$$\sum_n e^{-\alpha|n|} \psi_n^*(x')\, \psi_n(x) \qquad (4.50)$$

فإنه يمكن كتابة (4.48) كما يلى :

$$f(x) = \lim_{\alpha \to +0} \int dx' f(x') \sum_n e^{-\alpha |n|} \psi_n^*(x') \psi_n(x) \qquad (4.51)$$

وعندئذ يصبح المقدار

$$\sum_n e^{-\alpha |n|} \psi_n^*(x') \psi_n(x) = \delta(x' - x, \alpha) \qquad (4.52)$$

غامضًا ، مع العلم أنه يمكن اختيار مضروب آخر يجعل المجموع (4.52) متقاربًا ، وبما أنه فى نهاية المطاف (أى بعد إجراء عملية التكامل) ، سنفترض أن المضروب α يساوى الصفر ، لذا فإن إدخال المضروب يمكن أن يتم بطرائق مختلفة . ويسمى المقدار (4.52) بالتابع - دلتا الغامض أما التابع - دلتا نفسه فيمكن اعتباره مساويًا المقدار التالى :

$$\delta(x' - x) = \sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x) \qquad (4.53)$$

ولندرس الصيغة الملموسة لتابع ديراك δ عندما تكون الحركة حرة ، حيث يمكن كتابة متجهات الواحدة فى فراغ هيلبرت ، انظر (4.33) ، بالشكل التالى :

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{2\pi n i}{L} x} \qquad (4.54)$$

ومن (4.54) ينتج شرط التعامد والمعايرة :

$$\frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} e^{\frac{2\pi i}{L} x (n - n')} dx = \frac{\sin \pi (n - n')}{\pi (n - n')} \qquad (4.55)$$

عندئذ ، يكون التابع δ طبقا لـ (4.53) بالشكل التالى :

$$\delta(x' - x) = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{\frac{2\pi n}{L} i (x - x')} \qquad (4.56)$$

ولندخل متغيرًا جديدًا $k = \frac{2\pi n}{L}$ بعد أن نعتبر أن :

$$\Delta k = \left(\frac{2\pi}{L}\right) \Delta n = \frac{2\pi}{L} \qquad (4.57)$$

لأن $\Delta n = 1$.

وعندما ينتهى طول الدورية L إلى اللانهاية $(\Delta k \to 0)$ فإن المجموع (4.56) يتحول إلى التكامل التالى :

$$\delta(x' - x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk\, e^{ik(x-x')} = \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} dk \cos k(x' - x) \qquad (4.58)$$

أما بالنسبة للتابع $f(x)$ فسنجد عوضًا عن (4.45) العلاقة الآتية :

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} dk \int dx' f(x') \cos k(x' - x) \qquad (4.59)$$

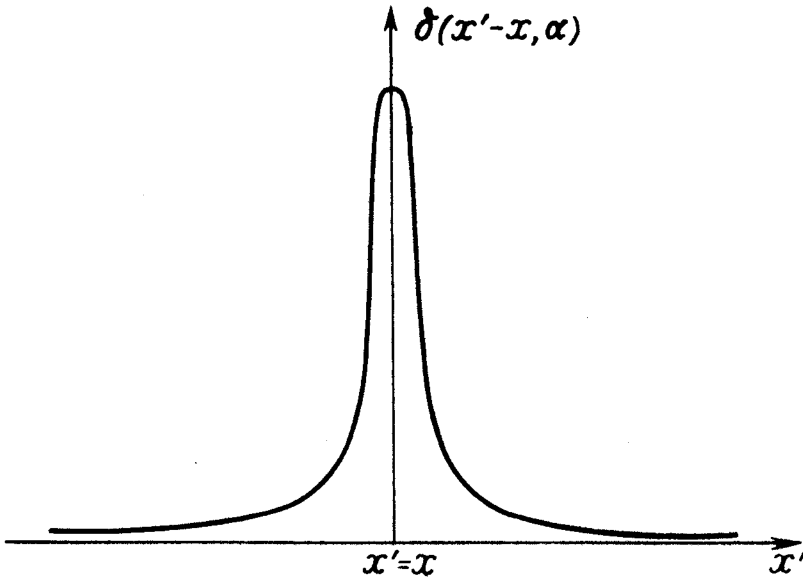
إن للترتيب فى عملية العلاقة السابقة أهمية كبيرة فيجب أولا إجراء التكامل بالنسبة لـ x' ومن ثم بالنسبة لـ k. أما إذا أردنا تغيير ترتيب عملية التكامل فيجب استعمال التابع ـ دلتا الغامض $(\alpha > 0)$:

$$\delta(x' - x, \alpha) = \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} dk e^{-\alpha k} \cos k(x' - x) \qquad (4.60)$$

وعندئذ نستطيع كتابة المساواة (4.59) كما يلى :

$$f(x) = \lim_{\alpha \to 0} \int dx' f(x') \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} dk\, e^{-\alpha k} \cos k(x' - x) \qquad (4.61)$$

فإذا حسبنا التكامل (4.60) نجد للتابع δ الغامض ، أنظر الشكل ٤ ـ ٤ ، صيغة بالشكل التالى :



الشكل ٤ ـ ٤ . التابع ـ دلتا الغامض .

$$\delta(x' - x, \alpha) = \frac{1}{\pi} \frac{\alpha}{\alpha^2 + (x' - x)^2} \qquad (4.62)$$

وعندما $x' = x$ يكون لدينا :

$$\delta(x' - x, \alpha) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\alpha} \to \infty \,, \qquad (\alpha \to 0) \qquad (4.63)$$

أما عندما $x' \neq x$ فيكون لدينا :

$$\delta(x' - x, \alpha) = \frac{1}{\pi} \frac{\alpha}{(x' - x)^2} = 0 \,, \qquad (\alpha \to 0)$$

وعليه نجد أن التابع ـ دلتا يتمتع بالخاصة التالية :

$$\delta(x' - x) = \begin{cases} \infty, & (x' = x) \\ 0, & (x' \neq x) \end{cases} \qquad (4.64)$$

أما فى حالة تكامل فورييه فإن التابع ـ دلتا يساوى :

$$\delta(x' - x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ik(x'-x)} = \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} dk \cos k(x' - x) \qquad (4.65)$$

أى أننا نحصل على العبارة (4.58) نفسها والتى هى نتيجة للانتقال النهائى لسلسلة فورييه (4.56) . وبما أن نتيجة التكامل مستقلة عن طريقة الغموض فقد اقترح ديراك كتابة التكامل (4.59) بالشكل التالى :

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \int dx' f(x') \int_0^\infty dk \cos k(x' - x) \qquad (4.66)$$

مفترضًا إياه بمثابة انتقال نهائى ، انظر (4.61) . وإذا قارنا العلاقتين (4.65) و (4.66) ، حيث يوجد التابع ـ دلتا تحت التكامل فسنجد أن

$$\int \delta(x' - x) f(x') dx' = f(x) \qquad (4.67)$$

وبالطريقة نفسها إذا درسنا (4.64) فإننا نجد باعتبار ($b > a$) أن :

$$\int_a^b f(x') \delta(x' - x) dx' = - \int_b^a f(x') \delta(x' - x) dx' =$$

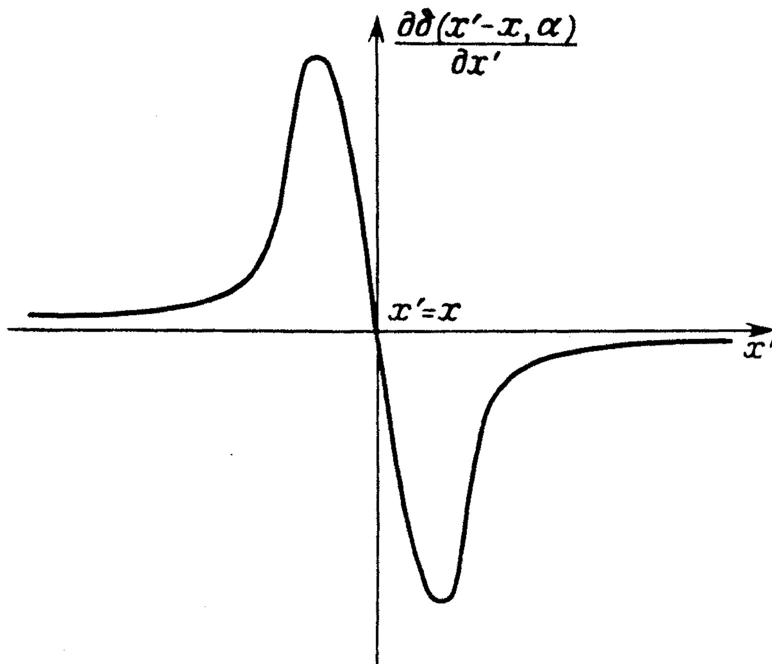
$$= \begin{cases} f(x), & (b > x > a) \\ 0, & (x > b \quad \text{أو} \quad x < a) \end{cases} \qquad (4.68)$$

أى لكى تكون النتيجة مختلفة عن الصفر يجب أن يقع x فى مجال عملية التكامل $a < x < b$. وبالرغم من الخواص الغريبة للتابع ـ دلتا يمكن التعامل معه كتابع عادى ؛ أى حساب مشتقته أو اعتباره مشتقة لتابع منقطع . ومن الأسهل لذلك أن نأخذ التابع ـ دلتا الغامض (4.62) ، جاعلين وسيط الغموض α منتهيًا إلى الصفر فى النتيجة النهائية . وعندئذ نرى أن مشتقة التابع ـ دلتا الغامض هى :

$$\frac{\partial \delta(x' - x, \alpha)}{\partial x'} = - \frac{2\alpha (x' - x)}{\pi (\alpha^2 + (x' - x)^2)^2} \qquad (4.69)$$

ويمثل الشكل ٤ ـ ٥ خطًا بيانيًا لمشتقة التابع ـ دلتا الغامض. أما التكامل الحاوى مشتقة التابع ـ دلتا فيكتب بالشكل التالى :

$$\int \delta'(x' - x) f(x') dx' = - f'(x) \qquad (4.70)$$



الشكل ٤ ـ ٥ . مشتقة التابع ـ دلتا (الغامض) .

وبالطريقة نفسها نستطيع أن نبرهن أن التابع δ هو مشتقة لتابع منقطع ولهذا لندخل التابع الغامض التالى :

$$\gamma(x'-x,\alpha)=\frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty e^{-\alpha k}\frac{\sin k(x'-x)}{k}\,dk=\frac{1}{\pi}\operatorname{arctg}\frac{x'-x}{\alpha} \quad (4.71)$$

الذى ينقطع عندما $\alpha\to 0$ أى أن :

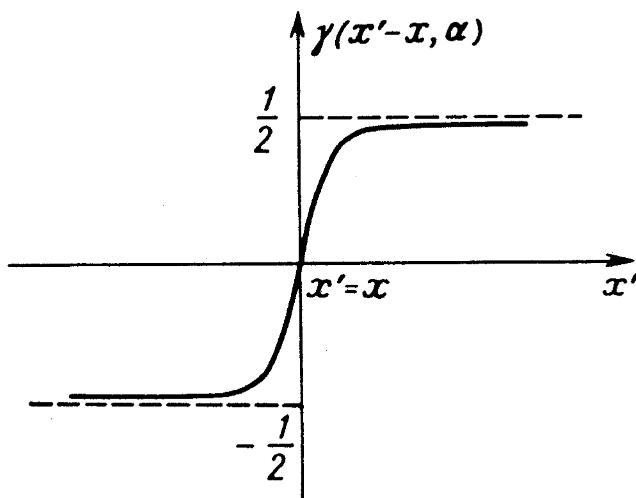
$$\gamma(x'-x)=\lim\gamma(x'-x,\alpha)=\frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty\frac{\sin k(x'-x)}{k}\,dk=$$

$$=\begin{cases}-1/2, & (x'<x)\\ 0, & (x'=x)\\ 1/2, & (x'>x)\end{cases} \quad (4.72)$$

ويمثل التابع ـ دلتا γ الغامض على الشكل ٤ ـ ٦ بخط متصل أما قيمته

العظمى (النهائية) فممثلة بالخط المتقطع . وباشتقاق التابع $\gamma(x'-x)$ نحصل على التابع ـ دلتا ، أى أن :

$$\delta(x'-x)=\gamma'(x'-x)=\frac{1}{\pi}\int_{0}^{\infty}\cos k(x'-x)\,dk \qquad (4.73)$$



الشكل ٤ ـ ٦ . التابع (فى النهاية منقطع) الذى مشتقته تساوى التابع ـ دلتا .

ويعنى ذلك أن التابع ـ دلتا يخولنا بوصف مشتقة التابع المنقطع . نأخذ تابعًا ما $f(x)$ ، يساوى إلى $f_1(x)$ عندما $x<x_0$ وإلى $f_2(x)$ عندما $x>x_0$ ، منقطعًا فى النقطة $x=x_0$ ، أى أن :

$$f_2(x_0)-f_1(x_0)=a \qquad (4.74)$$

ويمكن كتابة هذا التابع كما يلى :

$$f(x)=f_1(x)\left(\frac{1}{2}-\gamma(x-x_0)\right)+f_2(x)\left(\frac{1}{2}+\gamma(x-x_0)\right) \qquad (4.75)$$

أما مشتقته فتساوى :

$$f'(x)=a\delta(x-x_0)+\begin{cases} f_1'(x), & (x<x_0) \\ f_2'(x), & (x>x_0) \end{cases} \qquad (4.76)$$

ولنكتب بعض الصيغ المفيدة التى تبين خواص التابع ـ دلتا ، فنلاحظ أن :

$$\delta(x) = \delta(-x)$$

أى أن التابع دلتا تابع زوجى ،

$$\delta'(x) = -\delta'(-x) \qquad (4.77)$$

وأن مشتقة التابع ـ دلتا تابع فردى . وكذلك نجد أن :

$$\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|} \qquad (4.78)$$

$$\delta(\varphi(x)) = \sum_s \frac{\delta(x - x_s)}{|\varphi'(x_s)|} \qquad (4.79)$$

حيث x_s ـ الجذور البسيطة للمعادلة $\varphi(x) = 0$ ضمن المجال المدروس . ولاستنتاج المعادلة الأخيرة ينبغى أن نعتبر أن للتابع ـ دلتا نقطة شاذة $\varphi(x) = 0$ ، ولهذا يمكن كتابة التابع $\varphi(x)$ فى جوار النقطة x_s بالشكل التالى :

$$\varphi(x) = (x - x_s)\,\varphi'(x_s)$$

واستخدام المعادلة (4.78) بعد ذلك . وبصورة خاصة ينتج من (4.79) أن :

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{\delta(x-a) + \delta(x+a)}{2a} \qquad (4.80)$$

إذ يمكن اعتبار $a > 0$.

هـ) معايرة الطيف المستمر بواسطة التابع ـ دلتا . سنقتصر دراستنا على حالة الحركة الحرة عندما يعطى التابع الموجى بالعلاقة (انظر (4.26)) :

$$\psi(p, x) = Ae^{(i/\hbar)px} \qquad (4.81)$$

فإذا عايرنا (4.81) بواسطة التابع ـ دلتا فإنه يمكن حساب A من العلاقة .

$$\int \psi^*(p', x)\,\psi(p, x)\,dx = A^2 \int e^{i(p-p')\frac{x}{\hbar}}\,dx =$$
$$= A^2 \hbar 2\pi \frac{1}{2\pi} \int e^{i(p-p')\xi}\,d\xi = \delta(p'-p) \qquad (4.82)$$

وإذا لاحظنا أن :

$$\frac{1}{2\pi} \int e^{i(p'-p)\xi}\,d\xi = \delta(p'-p) \qquad (4.83)$$

نجد قيمة معامل المعايرة A تساوى :

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \qquad (4.84)$$

أى أن المعايرة بالتابع ـ دلتا تأخذ الشكل التالى :

$$\psi(p, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{(i/\hbar)px} \qquad (4.85)$$

مع العلم أن :

$$\int \psi^*(p', x)\,\psi(p, x)\,dx = \delta(p'-p) \qquad (4.86)$$

وإذا قارنا الآن عملية معايرة الطيف المنقطع بواسطة رمز كرونيكر ـ فايرشتراس ، أي

$$\int \psi^*_{n'}(x)\,\psi_n(x)\,dx = \delta_{nn'} \qquad (4.87)$$

مع معايرة الطيف المستمر بواسطة التابع ـ دلتا ، انظر (4.86) ، فإنه يمكن أن نكتب شرطى المعايرة بالشكل الآتى :

عندما يكون الطيف متقطعًا :

$$\sum_{n'=n_1}^{n_2} \delta_{nn'} = \begin{cases} 1\,, & (n_1 \leqslant n \leqslant n_2) \\ 0\,, & (n < n_1 \text{ أو } n > n_2) \end{cases} \qquad (4.88)$$

أما عندما يكون الطيف مستمرًا فنجد

$$\int_{p_1}^{p_2} \delta(p' - p)\,dp' = \begin{cases} 1\,, & (p_1 < p < p_2) \\ 0\,, & (p < p_1 \text{ أو } p > p_2) \end{cases} \qquad (4.88a)$$

ويجب الانتباه إلى أن الحالة الأخيرة تتطلب دراسة خاصة عندما $p = p_1$ أو $p = p_2$ تتعلق بطريقة غموض التابع ـ دلتا . أما فى الحالة ثلاثية الأبعاد وعندما تكون الحركة مسايرة لاتجاه الاندفاع p فيجب أن نضع بدلا من (4.85) التابع :

$$\psi(p,\ r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{(i/\hbar)(pr)} \qquad (4.89)$$

وتتم عملية المعايرة فى هذه الحالة*

---

* سنعتبر أن حدود التكاملات غير المحدودة من $-\infty$ إلى $+\infty$ أما عدد التكاملات فيتحدد بعدد التفاضلات ، مثلا :

$$\int d^3x = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz$$

$$\int \psi^*(p', r)\,\psi(p, r)\,d^3x = \delta(p' - p) \qquad (4.90)$$

حيث يكون التابع ثلاثى الأبعاد ـ دلتا بالشكل التالى :

$$\delta(p' - p) = \delta(p'_1 - p_1)\,\delta(p'_2 - p_2)\,\delta(p'_3 - p_3) = \frac{1}{8\pi^3}\int e^{i(p'-p)\xi}\,d^3\xi \qquad (4.91)$$

و) حل معادلة بواصون من أجل شحنة نقطية . من المعلوم أن معادلة بواسون تكتب بالشكل التالى :

$$\nabla^2\Phi(r) = -4\pi\rho(r) \qquad (4.92)$$

وعليه ، يمكن دراسة كثافة الشحنة النقطية بواسطة التابع ثلاثى الأبعاد ـ دلتا ، أى أن :

$$\rho(r) = \delta(r) = \frac{1}{8\pi^3}\int e^{ikr}\,d^3k \qquad (4.93)$$

حيث اعتمدنا أن الشحنة الكلية تساوى الواحد* . فإذا عوضنا (4.93) فى (4.92) نحصل من أجل حساب الكمون على الصيغة التالية :

$$\nabla^2\Phi = -\frac{1}{2\pi^2}\int e^{ikr}\,d^3k \qquad (4.94)$$

عندئذ يكون حل المعادلة (4.94) بالشكل التالى :

$$\Phi = \frac{1}{2\pi^2}\int \frac{e^{ikr}}{k^2}\,d^3k \qquad (4.95)$$

---

* فى الحقيقة ، تنعدم الكثافة $\delta(r)$ فى كل النقاط $(r \neq 0)$ وتصبح لا نهائية فى النقطة $(r = 0)$. عدا ذلك عند التكامل فى كل نقاط الفراغ نجد أن الشحنة الكلية تساوى الواحد

$$\int \delta(r)\,d^3x = 1$$

وللتأكد من ذلك يجب التأثير بمؤثر لابلاس ∇^2 على التابع (4.95) ومنه واستنادا على العلاقة :

$$\nabla^2 e^{ikr} = -k^2 e^{ikr}$$

نبرهن أن الحل (4.95) يحقق المعادلة (4.94) . ويمكن كتابة التكامل (4.95) بشكل آخر بواسطة الاحداثيات الكروية للمتجه k ، أى أن :

$$d^3k = k^2\, dk \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

وبتوجيه المحور $k_z = k_3$ باتجاه المتجه r نستطيع كتابة (4.95) كما يلى :

$$\Phi = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty dk \int_0^\pi e^{ikr\cos\theta} \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \qquad (4.96)$$

وبعد إجراء التكامل (4.96) بالنسبة للزاوتين θ و φ نجد أن :

$$\Phi = \frac{2}{\pi r} \int_0^\infty \frac{\sin kr}{k}\, dk \qquad (4.97)$$

وبما أن :

$$\int_0^\infty \frac{\sin kr}{k}\, dk = \frac{\pi}{2}$$

لذا فإن قيمة الكمون Φ تساوى :

$$\Phi = \frac{1}{r} \qquad (4.98)$$

ومنه نجد أن :

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(r) \qquad (4.99)$$

وستستخدم هذه العلاقة كثيرًا فى المستقبل مثلا عند حساب قوى التماس .

البند ٥ ـ بعض الطرائق التقريبية لحل معادلة شرودينجر

أ) طريقة التقريب شبه التقليدى . لقد ذكرنا فى البند ٢ أن معادلة شرودينجر للتابع الموجى تكتب بالشكل التالى :

$$\psi = A e^{(i/\hbar) S} \qquad (5.1)$$

وهى مكافئة للمعادلة التى يحققها التابع S ، انظر (2.13) ، أى أن :

$$\frac{1}{2m_0}(\text{grad } S)^2 + V - E - \frac{i\hbar}{2m_0}\nabla^2 S = 0 \qquad (5.2)$$

وبمقارنة هذه المعادلة مع معادلة هاملتون ـ جاكوبى لتابع التأثير S

$$\frac{1}{2m_0}(\text{grad } S)^2 + V - E = 0 \qquad (5.3)$$

نجد أن الحد الأخير فى المعادلة الكوانتية (5.2) يتناسب طردًا مع معامل بلانك $\hbar$ ويدخل تعديلا صغيرًا على المعادلة (5.3) عندما يتحقق الشرط التالى :

$$(\text{grad } S)^2 \gg \hbar \,|\nabla^2 S| \qquad (5.4)$$

ويسمى التقريب المعرّف بالمعادلة (5.4) ، بالتقريب شبه التقليدى . وبما أن $p = \text{grad } S$ لذا يمكن كتابة المعادلة الأخيرة كما يلى :

$$\frac{\hbar}{p^2}|\,\text{div}\, \boldsymbol{p}\,| \ll 1$$

أما للحالة أحادية البعد فسيكون لدينا :

$$\frac{\hbar}{p^2}\left|\frac{dp}{dx}\right| = \left|\frac{d\,(\hbar/p)}{dx}\right| = \left|\frac{d\lambda}{2\pi\, dx}\right| \ll 1 \qquad (5.5)$$

ويستنتج منه أن التقريب شبه التقليدى يكون أكثر دقة بقدر ما يكون الطول الدوبرويلى للموجة مقدارًا ثابتًا أو طفيف التغير ولنوضح ذلك بمثال ملموس ، بما أن :

$$p = \sqrt{2m_0(E - V)} \qquad (5.6)$$

لذا يمكن كتابة الشرط (5.5) كما يلى :

$$\frac{\hbar}{p^2}\left|\frac{dp}{dx}\right| = \left|\frac{m_0 F \hbar}{p^3}\right| \ll 1 \qquad (5.7)$$

حيث $F = -\frac{\partial V}{\partial x}$ — القوة المؤثرة على الجسم . ومنه ، نستنتج ارتياب التقريب شبه التقليدى عندما يكون الاندفاع صغيرًا ، وخاصة فى تلك النقاط التى يجب أن يسكن طبقًا للنظرية التقليدية ، الجسيم فيها $(E = V,\ \ p = 0)$. ويحدث ذلك عندما يقع الجسيم فى الحفرة الكمونية ويصطدم بجدرانها مغيرًا اتجاه حركته (نقطة انعطاف) . ويمكن تفسير كل ذلك ببساطة إذا لاحظنا أن طول موجه دو برويل ينتهى إلى اللا نهاية عندما $p \to 0$ أى عندما تبرز الخواص الموجية للجسيم بشدة .

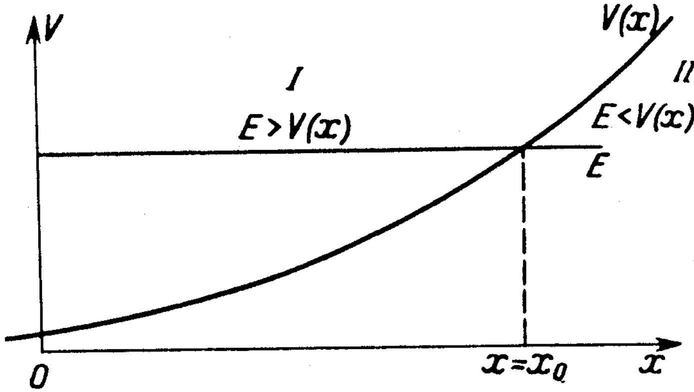
ب) طريقة وينتسل - كراميرس - بريليون *Wentzel - Kramers - Brillouin (W.K.B)*

لقد لاحظنا سابقا تكافؤ المعادلة (5.2) مع معادلة شرودينجر ، ولهذا سنحاول على أساس النظرية الموجية ، دراسة المعادلة (5.2) معتبرين أن الحد المتناسب مع h طاقة كامنة كوانتية إضافية فى معادلة هاملتون - جاكوبى ، أى أن :

$$V^{qu} = -\frac{i\hbar}{2m_0}\nabla^2 S \qquad (5.8)$$

وبما أن حل المعادلة غير الخطية (5.2) فى الحالة العامة أصعب من حل معادلة شرودينجر الخطية ، لذا لقد فشلت المحاولات العديدة لتطوير النظرية الكوانتية بإيجاد حل دقيق للمعادلة (5.2) . إلا أن (*W.K.B.*) نجحوا فى إيجاد حل تقريبى للمعادلة (5.2) وذلك بإبقاء الحدود من المرتبة $\hbar$ ، وقد تبين فيما بعد أن حلهم كان ملائمًا ومناسبًا لدراسة مجموعة أخرى من المسائل فى الميكانيكا الكوانتية ، ولذلك تسمى هذه الطريقة ، المطبقة فى حل المسائل أحادية البعد ، بطريقة (*W.K.B.*) التقريبية .

سنعتبر أن الطاقة الكامنة تابع (دالة) أملس بالنسبة للمتغير x ، (انظر الشكل ٥ ـ ١) ، وإذا فرضنا أن E هى طاقة الجسيم فيمكن تقسيم مجال



الشكل ٥ ـ ١ . توضيح حل المعادلة الموجية بطريقة W.K.B.

تغيّره إلى قسمين : الأول I $(x < x_0)$ حيث تكون الطاقة E أكبر من الطاقة الكامنة V ، أى $E > V$ والثانى II إذ تكون فيه$(x > x_0)$و$E < V$ ، أما على الحد بين هاتين المنطقتين فستكون $(x = x_0)$ و $E = V(x_0)$ ، لذا تكتب المعادلة الأساسية (5.2) فى الحالة أحادية البعد بالشكل التالى :

$$S'^2 - i\hbar S'' = 2m_0(E - V) = p^2 \qquad (5.9)$$

ولنبحث الآن عن حل هذه المعادلة فى المنطقة الأولى ($E > V$) ، حيث يلعب المقدار $p^2 > 0$ دور مربع الاندفاع التقليدى ، ولنكتبه بهذا الشكل :

$$S = S_0 + S_1 + S_2 + \ldots \qquad (5.10)$$

حيث لا يتعلق المقدار S_0 بـ $\hbar$ أما S_1 فتتناسب طردًا مع $\hbar$ و S_2 مع $\hbar^2$ . . . وهكذا ، ولنعوض السلسلة (5.10) فى المعادلة (5.9) بعد إهمال الحدود المتناسبة مع $\hbar^2$ فما فوق فنجد أن :

$$S_0'^2 + 2S_0'S_1' - i\hbar S_0'' = p^2 \qquad (5.11)$$

ومن تساوى الحدود المستقلة عن $\hbar$ فى طرفى المعادلة ، ثم المتناسبة مع $\hbar$ (ولهذا من الضرورى اعتبار المقدار S_1 متناسبًا مع $\hbar$) نجد أن :

$$S_0'^2 = p^2, \quad 2S_0'S_1' = i\hbar S_0'' \qquad (5.12)$$

ومنه نستخلص أن :

$$S_0 = \pm \int_x^{x_0} p\,dx, \quad S_1 = i\hbar \ln \sqrt{p} \qquad (5.13)$$

وعند الاقتصار على الحدود من المرتبة h سيكون لدينا :

$$S = S_0 + S_1 = \pm \int_x^{x_0} p\,dx + i\hbar \ln \sqrt{p} \qquad (5.14)$$

وإذا عوضنا (5.14) فى (5.1) نجد من أجل التابع الموجى فى المنطقة I $(x < x_0)$ العبارة التالية :

$$\psi_{x<x_0} \simeq \frac{1}{\sqrt{p}} [a \sin(z+\gamma) + b\cos(z+\gamma')] \qquad (5.15)$$

حيث :

$$z = \frac{1}{\hbar}\int_x^{x_0} p\,dx > 0, \quad p = \sqrt{2m_0(E-V)}$$

وبالطريقة نفسها نجد فى المنطقة II $(x > x_0)$ عندما $p^2 < 0$ أن :

$$\psi_{x>x_0} \simeq \frac{1}{\sqrt{|p|}} (Ae^{-|z|} + Be^{|z|}) \qquad (5.16)$$

حيث* :

$$|z| = \frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{x} |p|\,dx > 0, \qquad |p| = \sqrt{2m_0(V-E)} \qquad (5.17)$$

ولا تعتبر الثوابت a, b, A, B والطوران γ, γ' اختيارية لأنها ترتبط فيما بينها ، كما سنرى فيما بعد ، بعلاقات ناتجة عن شرط دمج الحلين فى النقطة $x = x_0$ حيث يتم الانتقال من المنطقة I إلى المنطقة II ، ولذلك تعتبر

* عندما يكون الحاجز الكمونى على يسار النقطة الخاصة (المميزة) يجب تبديل حدى التكامل عند حساب z و $|z|$ بحيث يكون الحد الأسفل أصغر من الحد الأعلى . وعليه يكون المقداران z و $|z|$ موجبين .

المعادلتان (5.15) و (5.16) الحلين التقريبيين بطريقة .W.K.B ومنهما نرى أن التابع الموجى يتغير عندما $E > V$ ، كما يتغير فى الحفرة الكمونية ، انظر (4.4) ، أى بقانونى جيبى أو تجيبى ، كما يتغير عندما $E < V$ كما لو كان الجسيم على الحاجز الكمونى بقانون أسى ، انظر (4.7) . وبمقارنة الحلول التى حصلنا عليها عندما $V_0 = \text{const}$ مع الحلول عندما تكون الطاقة الكامنة تابعًا لـ x نرى أنه يمكن استنتاج الأولى من الأخرى باستبدال مساحة الحاجز المستطيل المتكوّن بين المحور x والمحور الذى قيس عليه المقدار

$$\varkappa = \frac{\sqrt{2m_0(V_0 - E)}}{\hbar} = \frac{|p|}{\hbar}$$

بالمساحة المقابلة التى تعتبر V والتابعة لـ x ويمكن تمثيل ذلك شكليًا كما يلى :

$$\frac{|p|}{\hbar} x \to \frac{1}{\hbar} \int_0^x |p| \, dx$$

ويمكن إجراء انتقال مشابه فى حالة الحفرة الكمونية أيضًا . وهكذا نرى أن شكل تابع الطاقة الكامنة لا يغير من طبيعة الحل الذى يتحدد بالفرق بين E و V . إذ يعطى الحلان (5.15) و (5.16) تقريبًا جيدًا فقط فى المناطق البعيدة جدًا عن النقطة الخاصة (المميزة) x_0 . حيث تكون p^2 كبير جدًا أما بالقرب من $x \to x_0$ فيكون $p^2 \to 0$ ولهذا ينتهى المخرج (المقام) فى (5.15) و (5.16) إلى الصفر ويتباعد الحلان . وسيكون التقريب المذكور كافيًا لمسائل كثيرة لو استطعنا التعبير عن الثابتين A, B بدلالة a, b لأن المجال $|x - x_0| \to 0$ ضيق جدًا . ولكننا لا نستطيع معرفة العلاقة بين هذه الثوابت إلا بدمج التوابع ، ذلك الدمج الذى يتحقق على الحدود فقط ، أى عندما $x = x_0$ (ونعنى بكلمة دمج تساوى التوابع الموجية ومشتقاتها الأولى فى النقطة $x = x_0$) . ولهذا كان من الضرورى كتابة الحل

التقريبى لـ ψ بحيث تحقق (5.15) عندما يكون المقدار p^2 كبيرًا ، أما عندما $x - x_0$ فنكتب

$$p^2 = -(x - x_0)\, 2m_0 V'(x_0) = -\alpha \hbar^2 (x - x_0)$$

وعندئذ يحقق الحل التقريبى المعادلة التالية :

$$\psi'' - \alpha(x - x_0)\psi = 0 \qquad (5.19)$$

حيث فرضنا

$$\alpha = \frac{2m_0}{\hbar^2} V'(x_0)$$

بإدخال متغير جديد ξ بدلا من x بحيث يكون

$$\xi = \alpha^{1/3}(x - x_0) \qquad (5.20)$$

يمكننا أن نكتب ، عوضا عن المعادلة (5.19) ، المعادلة التالية :

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi\psi = 0 \qquad (5.21)$$

ويمثل الحل المستقل للمعادلة (5.21) خطيًا بأحد التابعين $U(\xi)$ و $V(\xi)$ اللذين يكتبان بشكل تكاملين هما :

$$U(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty [e^{t\xi - 1/3 t^3} + \sin(t\xi + {}^1/_3 t^3)]\, dt \qquad (5.22)$$

$$V(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \cos(t\xi + {}^1/_3 t^3)\, dt \qquad (5.23)$$

ويمكن التأكد بسهولة أن هذين التكاملين يحققان المعادلة (5.21) . فمثلا عندما نضع التكامل الثانى (5.23) فى المعادلة (5.21) ونغيّر ترتيب التفاضل نحصل على أن :

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \xi\right) \int_0^\infty \cos(t\xi + {}^1/_3 t^3)\, dt =$$

$$= \int_0^\infty (t^2 + \xi)\cos(t\xi + {}^1/_3 t^3)\, dt = \int_0^\infty d[\sin(t\xi + {}^1/_3 t^3)] = 0 \qquad (5.24)$$

ويجب فهم التكامل الأخير كقيمة نهائية ، أى أن :

$$\lim_{\delta \to 0} \int_0^\infty d[e^{-\delta t} \sin(t\xi + {}^1/_3 t^3)] = 0 \qquad (5.25)$$

وبتبديل مشابه للتكامل (5.22) فى المعادلة (5.21) نرى أنها تتحقق أيضًا*، أما العبارتان المقاربتان ، للتابعين $V(\xi)$ و $U(\xi)$ عندما $|\xi| \gg 1$ و $\xi > 0$ فهما :

$$V(\xi) \simeq \frac{1}{2}\xi^{-1/4}e^{-2/3\,\xi^{3/2}} \qquad (5.26)$$

$$U(\xi) \simeq \xi^{-1/4}e^{2/3\,\xi^{3/2}} \qquad (5.27)$$

وهكذا يكون التابع $V(\xi)$ أسيا متناقصا مع تزايد ξ والتابع $U(\xi)$ أسيا متزايدا أما من أجل القيم السالبة الكبيرة ($\xi < 0$) فسيكون التابعان V و U اهتزازيين (مذبذبين) ، أى أن :

$$V(-|\xi|) \simeq |\xi|^{-1/4}\sin\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \qquad (5.28)$$

$$U(-|\xi|) \simeq |\xi|^{-1/4}\cos\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \qquad (5.29)$$

وبحساب قيم $|z|$ و z فى المساواتين (5.15) و (5.16) ، عندما $x \to x_0 + 0$ و $x \to x_0 - 0$ ، نجد على الترتيب أن :

$$z = \frac{1}{h}\int_{x}^{x_0} p\,dx \simeq \frac{2}{3}|\xi|^{3/2}, \qquad x \to x_0 - 0$$

$$|z| = \frac{1}{h}\int_{x_0}^{x} |p|\,dx \simeq \frac{2}{3}\xi^{3/2}, \qquad x \to x_0 + 0$$

وبما أن الحلين (5.26) - (5.29) يجب أن يتطابقا مع الحلين (5.15) و (5.16) فى مناطق تعيينها ، فإننا نجد من تساوى الحلين التقاربيين أن العلاقات تربط الثوابت فيما بينها بالشكل التالى :

$$A = \frac{a}{2}, \qquad B = b, \qquad \gamma = \gamma' = \frac{\pi}{4} \qquad (5.30)$$

وبفرض أن $b = 0$ و $a \neq 0$ فى المعادلتين (5.15) و (5.16) ، نستخلص الزوج الأول من الحلول المندمجة ، أى :

---

* نلاحظ أن التابعين V و U يرتبطان مع تابع بيسيل $K_{1/3}$ من المرتبة $\pm 1/3$ للوسيط العقدى (عندما $\xi > 0$) أو بتابع بيسيل العادى $J_{\pm 1/3}$ (عندما $\xi < 0$) .

$$\psi_{x<x_0} \simeq \frac{a}{\sqrt{p}} \sin\left(z + \frac{\pi}{4}\right) \qquad (5.31)$$

$$\psi_{x>x_0} \simeq \frac{a}{2\sqrt{|p|}} e^{-|z|} \qquad (5.32)$$

حيث يمثل الحل المتناقص (5.32) ، فى المجال $x > x_0$ ، استمرارًا تحليليًا للحل الجيبى (5.31) فى المجال $x < x_0$. ولكى نعيّن الاستمرار التحليلى للحل الأسى المتزايد عندما $x > x_0$ ينبغى علينا أن نفترض :

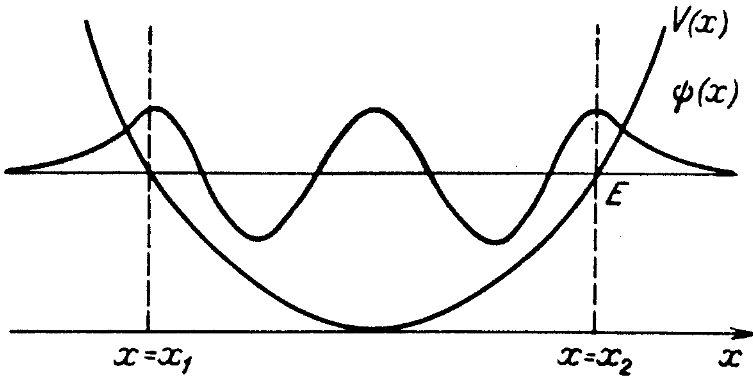
$$a = 0, \quad b \neq 0 \qquad (5.33)$$

وعندئذ نستخلص الزوج الثانى من الحلول المندمجة ، أى :

$$\psi_{x<x_0} \simeq \frac{b}{\sqrt{p}} \cos\left(z + \frac{\pi}{4}\right) \qquad (5.34)$$

$$\psi_{x>x_0} \simeq \frac{b}{\sqrt{|p|}} e^{|z|} \qquad (5.35)$$

جـ) تكميم الحفرة الكمونية بالتقريب شبه التقليدى . تسمح العلاقات السابقة بإجراء تكميم (أى إيجاد سويات الطاقة) لجسيم واقع فى حفرة كمونية بطريقة .W.K.B التقريبية ، ولهذا نفترض أن لدينا حفرة كمونية اختيارية ملساء الشكل ، انظر الشكل ٥ ـ ٢ .



الشكل ٥ ـ ٢ . تكميم الحفرة الكمونية بطريقة .W.K.B .

إن التكميم بطريقة .W.K.B يعنى إيجاد تلك الشروط التى من أجلها ينتهى الحل من جهتى الحاجز الكمونى ($x < x_1$, $x > x_2$) إلى الصفر . إذ يكون التابع الموجى طبقًا لـ (5.31) فى منطقة الحفرة الكمونية المتاخمة للحاجز ($x - x_2$) بالشكل التالى :

$$\psi_{x<x_2} \simeq \frac{a'}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right) \qquad (5.36)$$

وبالطريقة نفسها نجد فى منطقة الحفرة الكمونية المجاورة لحد حاجز آخر $x = x_1$ أن :

$$\psi_{x>x_1} \simeq \frac{a}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right) \qquad (5.37)$$

ويجب أن يتطابق هذان الحلان فى كل نقطة من الحفرة الكمونية $x < x_1 < x_2$ تبعد بعدًا كافيًا عن حدى الحاجز الكمونى . وإذا دمجنا التابعين (5.36) و (5.37) فى أية نقطة من الحفرة الكمونية فاصلتها x ، أى تساوى التابعين ومشتقاتهما فى هذه النقطة ، نجد أن :

$$a' \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right) - a \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right) = 0$$

$$a' \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right) + a \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right) = 0$$

ولكى يكون حلهما مخالفًا للصفر يجب أن ينعدم معين أمثالهما وعليه نجد أن :

$$\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p\,dx + \frac{\pi}{2}\right) = 0$$

وإذا لاحظنا أن التكامل $\int_{x_1}^{x_2} p\,dx$ لا يمكن أن يكون سالبًا ، لأن $p = \sqrt{2m_0(E-V)} \geqslant 0$ ، نجد أن :

$$\frac{1}{h}\int_{x_1}^{x_2} p\,dx+\frac{\pi}{2}=(n+1)\,\pi, \quad n=0,\ 1,\ 2,\ \dots \qquad (5.38)$$

ومنه نكتب قانون التكميم المستنتج بطريقة .W.K.B التقريبية ، بدقة تتناسب مع الحدود ذات المرتبة h بالشكل التالى :

$$\oint p\,dx=2\pi h\,(n+{}^1/_2)=h\,(n+{}^1/_2) \qquad (5.39)$$

لقد وضع بور هذه الفرضية قبل ظهور الميكانيكا الكوانتية ، ولكنها لم تحتو عندئذ على الحد ${}^1/_2 h$ ، وهى معروفة كقانون تكميم بور ـ زميرفيلد (فرضية الحالات المستقرة) . ومن الممكن إهمال الحد ${}^1/_2 h$ فى شرط التكميم شبه التقليدى فى حالات عالية التهيج أعدادها الكوانتية $n >> 1$ ولكنه يصبح مهما عندما يتعلق الأمر بالسوية الأساسية $n = 0$. فعند حل مسألة الهزاز التوافقى مثلا ، انظر البند ٧ ، نرى أنه من الضروى ألاّ تنعدم طاقة السوية الأساسية ـ طاقة الصفر ـ وهى تساوى فعلا ${}^1/_2 h$ ؛ ومع ذلك فإن إهمال هذا الحد لا يؤثر على طيف الطاقة لأن طيفها ، كما سنرى فى البند ٩ يتعين بفرق طاقتى السويتين المرتبطتين فى حالة الهزاز التوافقى ، ولا تتعارض هذه النتيجة الكوانتية مع فرضية بور الثانية أى مع شرط التواترات . ولحساب معامل المعايرة فى التوابع الموجية شبه التقليدية يكفى أن نحصر التكامل فى المجال $x_1 < x < x_2$ (الحفرة الكمونية) لأن التابع الموجى يتناقص أسيا خارجها ، أى يمكن اعتباره معدومًا ، وعندئذ نجد أن :

$$a^2\int_{x_1}^{x_2}\frac{dx}{p}\sin^2\left[\frac{1}{h}\int_{x_1}^{x}p\,dx+\frac{\pi}{4}\right]=1$$

وبما أن الجيب تابع سريع التذبذب لذا يمكننا بدرجة كافية من الدقة تبديله بـ ${}^1/_2$ وعندئذ نكتب (5.40) بالشكل التالى :

$$ {}^1/_2 a^2\int_{x_1}^{x_2}\frac{dx}{p}=1 \qquad (5.41)$$

وبما أن دور الاهتزاز $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$ يساوى إلى

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} = 2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{v} = 2m_0 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{p}$$

حيث $v = \frac{p}{m_0}$ سرعة الجسيم . ومنه نجد من أجل معامل المعايرة الدستور التالى :

$$a = \sqrt{\frac{2\omega m_0}{\pi}}$$

ومنه نستطيع كتابة التابع الخاص ψ فى (5.37) بطريقة .W.K.B كما يلى :

$$\psi \simeq \sqrt{\frac{2\omega}{\pi v}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right) \qquad (5.42)$$

د) مرور الجسيم عبر الحاجز الكمونى (ظاهرة النفق) . طبقًا للنظرية التقليدية لا يمكن لأى جسيم أن يتواجد إلا فى المناطق التى تكون فيها طاقته الكامنة V أصغر من طاقته الكلية E لأن طاقته الحركية تساوى

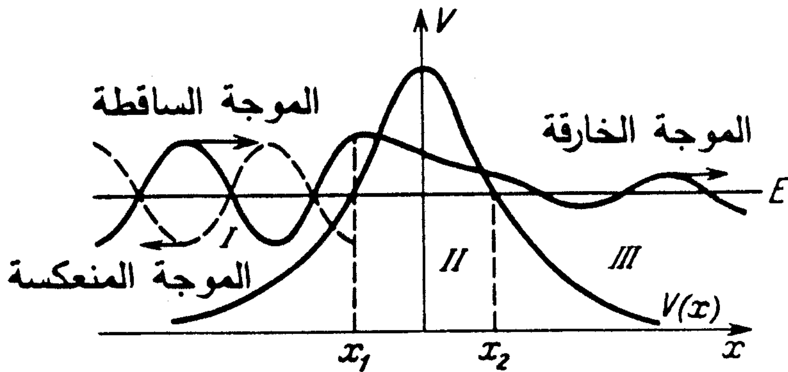
$$\frac{p^2}{2m_0} = E - V$$

وتكون موجبة دوما . أما فى المجال $V > E$ - الحاجز الكمونى - فتكون للاندفاع قيمة تخيلية ويستحيل طبقًا للنظرية التقليدية تواجد الجسيم هناك ، غير أنه فى الحالة عندما يقسّم الحاجز الفراغ إلى منطقتين بحيث تكون فى إحداهما (خارج الحاجز) $E > V$ وفى الأخرى (داخل الحاجز) $E < V$ ، فلا يمكن وفقًا للنظرية التقليدية للجسيم أن ينفذ من إحداهما إلى الأخرى عبر الحاجز الكمونى . أما فى النظرية الموجية فكل ما فى الأمر أن التابع الموجى يكون أسيا متناقصا عندما يكون الاندفاع تخيليا . وبما أن التابع الموجى لا ينعدم ضمن الحاجز الكمونى لذا يمكن للجسيم أن يخترق هذا الحاجز . وقد لوحظت وهى الظاهرة للجسيمات المجهرية أيضًا . وتسمى عملية مرور الجسيمات عبر الحاجز الكمونى بظاهرة النفق ، وهى ظاهرة

فريدة تتواجد فى النظرية الموجية وليس لها مثيل فى الميكانيكا التقليدية . ولندرس حاجزًا كمونيًا أملس $V(x)$ ، انظر الشكل ٥ ـ ٣ ، فإذا كانت قيمة الطاقة لا تتجاوز ارتفاع الحاجز الكمونى فيمكن تقسيم مناطق تغير الطاقة الكامنة إلى ثلاث هى : $-\infty < x < x_1$ و $(V(x) < E)$ $x_2 < x < \infty$ ؛ $(V(x) > E)$ $x_1 \leq x \leq x_2$ ، حيث أن بداية الحاجز x_1 و x_2 نهايته تتحددان من الشرط التالى :

$$V(x_1) = V(x_2) = E$$

وللحصول على احتمال مرور الجسيم عبر الحاجز الكمونى $V(x)$ ندرس الشكل الصريح للتابع الموجى الذى حصلنا عليه فى التقريب شبه التقليدى (5.31) - (5.35) . ففى المجال I ، $(-\infty < x < x_1)$ (الشكل ٥ ـ ٣) حيث



الشكل ٥ ـ ٣ . مخطط حاجز كمونى أملس الشكل . الموجتان الساقطة والخارقة ممثلتان بمنحنيين متصلين ، أما الموجة المنعكسة فبمنحنى متقطع .

$E > V(x)$ نجد موجتين : الموجة الساقطة على الحاجز والموجة المنعكسة عنه . ولهذا يكون الحل العام لمعادلة شرودينجر طبقًا لـ (5.31) و (5.34) بالشكل التالى :

$$\psi_I = \frac{a}{\sqrt{p}} \sin\left(z_1 + \frac{\pi}{4}\right) + \frac{b}{\sqrt{p}} \cos\left(z_1 + \frac{\pi}{4}\right) =$$

$$= \frac{e^{-i\left(z_1+\frac{\pi}{4}\right)}}{\sqrt{p}} + \frac{B_1}{\sqrt{p}} e^{i\left(z_1+\frac{\pi}{4}\right)} \quad (5.43)$$

حيث تساوى قيمة z_1 كما رأينا سابقًا إلى :

$$z_1 = \frac{1}{\hbar} \int_{x}^{x_1} p\, dx$$

أما الثابتان الاختياريان a, b فقد اخترناهما بحيث يؤول المعامل الموجود أمام الموجة الساقطة إلى الواحد (وهذا ممكن لأن ما يهمنا هو قسمة التدفقين وليس الاحتمال) بحيث يكون المعامل B_1 أمام الموجة المنعكسة اختياريًا ، أى أن :

$$a = i(B_1 - 1), \qquad b = 1 + B_1 \qquad (5.44)$$

أما فى المجال II أى عندما $(x_1 \leq x \leq x_2)$ حيث $E < V(x)$ فيمكن أن يحوى الحل جزءًا أسيًا متزايدًا أو متناقصًا بسبب عرض الحاجز المحدود ، لذا نجد طبقًا لـ (5.32) و (5.35) و (5.44) أن :

$$\psi_{II} = \frac{a}{2\sqrt{|p|}} e^{-|z_1|} + \frac{b}{\sqrt{|p|}} e^{|z_1|} = \frac{i(B_1 - 1)}{2\sqrt{|p|}} e^{-|z_1|} + \frac{B_1 + 1}{\sqrt{|p|}} e^{|z_1|} \qquad (5.45)$$

حيث :

$$|z_1| = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x} |p|\, dx \qquad (5.46)$$

وإذا استخدمنا المعادلة :

$$|z_1| + |z_2| = \int_{x_1}^{x} |p|\, dx + \int_{x}^{x_2} |p|\, dx = \int_{x_1}^{x_2} |p|\, dx \equiv \gamma \qquad (5.47)$$

فيمكن كتابة ψ_{II} كما يلى :

$$\psi_{II} = \frac{i(B_1 - 1)}{2\sqrt{|p|}} e^{-\gamma} e^{|z_2|} + \frac{B_1 + 1}{\sqrt{|p|}} e^{\gamma} e^{-|z_2|} \qquad (5.48)$$

وأما فى المجال III أى عندما $(x_2 < x < \infty)$ و $E > V(x)$ ، حيث يمكن للموجة الخارقة فقط أن تنتشر فنجد أن :

$$\psi_{III} = \frac{A_3}{\sqrt{p}} e^{i\left(z_2 + \frac{\pi}{4}\right)} \qquad (5.49)$$

حيث

$$z_2 = \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x} p\,dx \qquad (5.50)$$

وبعد أن نعتبر المعامل الموجود أمام الموجة المنعكسة مساويًا للصفر . أما سعة الموجة الخارقة فليست اختيارية لأن الحل الجيبى ، وفقًا لـ (5.31) و (5.32) و (5.34) و (5.35) ، يعد استمرارًا تحليليًا للحل (5.48) فى المجال II وبالتالى يكون :

$$A_3 = \frac{i}{2}(B_1 - 1)\,e^{-\gamma}, \qquad \frac{iA_3}{2} = (B_1 + 1)\,e^{\gamma} \qquad (5.51)$$

أما حلهما المشترك فيكون بالشكل التالى :

$$B_1 = \frac{{}^1\!/_4 e^{-\gamma} - e^{\gamma}}{e^{\gamma} + {}^1\!/_4 e^{-\gamma}}, \qquad A_3 = \frac{1}{i\,(e^{\gamma} + {}^1\!/_4 e^{-\gamma})} \qquad (5.52)$$

ولوصف ظاهرة النفق ندخل معامل شفافية الحاجز الذى قيمته المطلقة تساوى نسبة غزارة تيار الجسيمات الخارقة للحاجز إلى غزارة تيار الجسيمات الساقطة عليه ، أى أن :

$$D = \left| \frac{j_{\text{tr}}}{j_{\text{inc}}} \right| \qquad (5.53)$$

ولحساب تيار الجسيمات نستخدم المعادلة التالية :

$$j = \frac{i\hbar e}{2m_0}\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\,\psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \qquad (5.54)$$

وإذا بدلنا حلّى معادلة شرودينجر (5.43) و (5.49) فى هذه العلاقة نحصل على معامل الشفافية D التالى :

$$D = \frac{|j_{\text{tr}}|}{|j_{\text{inc}}|} = |A_3|^2 = \frac{1}{(e^{\gamma} + {}^1\!/_4 e^{-\gamma})^2} \qquad (5.55)$$

وفى الحالة الخاصة عندما تكون قيمة γ كبيرة جدًا (الحالة تستدعى الاهتمام من الناحية العملية) فإن معامل الشفافية (5.55) سيساوى إلى :

$$D \simeq e^{-2\gamma} = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m_0(V-E)}\,dx\right] \qquad (5.56)$$

وإذا عرفنا معامل الانعكاس بالعلاقة التالية :

$$R = \frac{|\, j_{ref}\,|}{|\, j_{inc}\,|} \qquad (5.57)$$

حيث j_{ref} تيار الموجة المنعكسة المعطى فى (5.43) ، يمكن التعبير عن R بدلالة B_1 كما يلى :

$$R = |\,B_1\,|^2 = \left(\frac{{}^1\!/_4 e^{-\gamma} - e^{\gamma}}{e^{\gamma} + {}^1\!/_4 e^{-\gamma}}\right)^2 \qquad (5.58)$$

ونجد ، عندما $\alpha >> 1$ ، أن :

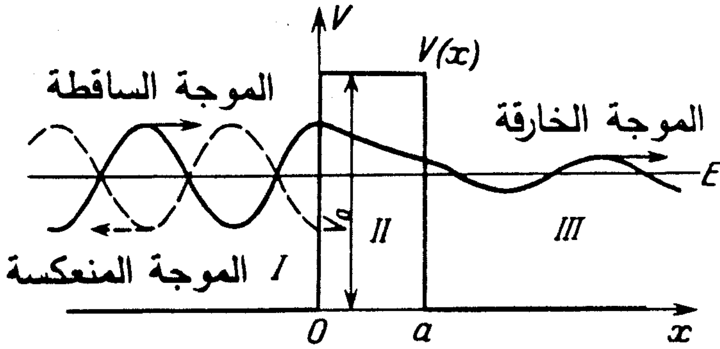
$$R \simeq 1 - e^{-2\gamma} \qquad (5.59)$$

وبمقارنة عبارتى D و R نلاحظ أن مجموع معاملى الشفافية والانعكاس يساوى الواحد ، أى أن :

$$D + R = 1 \qquad (5.60)$$

وكذلك نلاحظ من (5.56) و (5.59) أن معامل الشفافية يساوى الصفر وأن معامل الانعكاس يساوى الواحد عند الانتقال إلى النهاية الكلاسيكية ($\hbar \to 0 , \alpha \to \infty$) إذ لا يستطيع الجسيم عندئذ عبور الحاجز الكمونى . أما فى الميكانيكا الكوانتية حيث $\gamma \neq \infty$ فيمكن فهم حركة الجسيمات ضمن الحاجز الكمونى كنتيجة طبيعية للخواص الموجية للجسيمات الدقيقة . وتلاحظ مثيلة هذه الظاهرة فى إطار النظرية الموجية للضوء أيضًا ، مثلا فى ظواهر الانعكاس الداخلى الكلى المعروفة التى يمكن ملاحظتها عند انعكاس الضوء عن وسط كثافته أقل .

هـ) حالة الحاجز المستطيل . لندرس حاجزًا كمونيًا مستطيل الشكل ارتفاعه V_0 وعرضه a (الشكل ٥ ـ ٤) . أن مثل هذا الحاجز يستدعى الاهتمام بسبب إمكانية الحصول على حل دقيق وبسيط فى هذه الحالة ، يمكن بواسطته دراسة ما يسمى بالانعكاس فوق الحاجز أى عندما تكون طاقة



الشكل ٥ ـ ٤ . مرور الجسيم عبر حاجز كمونى مستطيل الشكل .

الجسيم E أكبر من ارتفاع الحاجز الكمونى ($E > V_0$) فالجسيم الذى طاقته أصغر من ارتفاع الحاجز $E < V_0$ يتحرك بالاتجاه الموجب للمحور x . وعندئذ سيكون حل معادلة شرودينجر فى كل المجالات ، أنظر (4.26) و (4.7) بالشكل التالى :

$$\psi_I = e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \qquad x < 0 \qquad \text{(المجال الاول)}$$
$$\psi_{II} = A_2 e^{-\varkappa x} + B_2 e^{\varkappa x} \qquad 0 < x < a \qquad \text{(المجال الثانى)} \qquad (5.61)$$
$$\psi_{III} = A_3 e^{ik(x-a)} \qquad x > a \qquad \text{(المجال الثالث)}$$

حيث

$$k^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}, \qquad \varkappa^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}(V_0 - E) \qquad (5.62)$$

مع أننا اعتبرنا المعامل الموجود أمام e^{ikx} يساوى الواحد بسبب المعايرة المناسبة وأن $B_1 e^{-ikx}$ يصف الموجة المنعكسة . أما على يمين الحاجز ($x > a$) فلا نجد سوى الموجة الخارقة $A_3 e^{ik(x-a)}$ ولحساب المعاملات المجهولة فى الحلول (5.61) نستخدم شروط استمرارية التوابع الموجية مع مشتقاتها على حدود الحاجز ، أى عندما $x = 0$ نجد أن :

$$1 + B_1 = A_2 + B_2$$
$$ik(1 - B_1) = \varkappa (B_2 - A_2) \qquad (5.63)$$

وعندما $x = a$ يكون لدينا :

$$A_2 e^{-\varkappa a} + B_2 e^{\varkappa a} = A_3$$
$$A_2 e^{-\varkappa a} - B_2 e^{\varkappa a} = -i\frac{k}{\varkappa} A_3 \qquad (5.64)$$

ومن المعادلتين الأخيرتين نستخلص أن :

$$A_2 = \frac{1 - i\frac{k}{\varkappa}}{2} e^{\varkappa a} A_3$$
$$B_2 = \frac{1 + i\frac{k}{\varkappa}}{2} e^{-\varkappa a} A_3 \qquad (5.65)$$

وإذا بدلنا A_2 و B_2 بقيمتهما فى المعادلتين (5.63) ، بعد أن نحذف منهما B_1 ، نجد أن :

$$A_3 = \frac{2}{2\,\mathrm{ch}\,\varkappa a + i\left(\frac{\varkappa}{k} - \frac{k}{\varkappa}\right)\mathrm{sh}\,\varkappa a} \qquad (5.66)$$

ويمكن حساب معامل الاختراق D من العلاقة العامة (5.53) بعد أخذ (5.66) بعين الاعتبار ، أى أن :

$$D = \frac{|j_{tr}|}{|j_{inc}|} = |A_3|^2 = \frac{4k^2\varkappa^2}{(k^2+\varkappa^2)^2\,\mathrm{sh}^2\,\varkappa a + 4k^2\varkappa^2} \qquad (5.67)$$

وعندما يكون عرض الحاجز كبيرًا بحيث تتحقق المتراجحة $\varkappa a >> 1$ نجد من المعادلة الدقيقة (5.67) ، العلاقة التقريبية التالية :

$$D \simeq \frac{16k^2\varkappa^2}{(k^2+\varkappa^2)^2} e^{-2\varkappa a} = D_0 e^{-2\varkappa a} \qquad (5.68)$$

ويمكن الحصول على قيمة المضروب الأسى للحاجز مستطيل الشكل ، الذى يلعب دورًا رئيسيًا من المعادلة (5.56) للحاجز الأملس ، والاختلاف يكمن فى ظهور المعامل D_0 الذى تقترب قيمته من الواحد . وإذا بدلنا $\varkappa$ بقيمتها من (5.62) فى (5.68) يمكن كتابة $\varkappa a >> 1$ كما يلى :

$$D = D_0 e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m_0(V_0 - E)}} \qquad (5.69)$$

وهكذا نرى أن العلاقة (5.69) تتطابق تقريبًا ، بالتقريب إلى المعامل D_0 ذى المرتبة الأولى ، مع النتيجة المستخلصة بطريقة W.K.B. من

العلاقة* (5.56) أى أن :

$$\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m_0(V_0-E)}=\frac{2}{\hbar}\int_0^a\sqrt{2m_0(V_0-E)}\,dx \qquad (5.70)$$

فإذا فرضنا الآن أن طاقة الجسيم أكبر من ارتفاع حاجز الكمون ، سيكون لحلّى معادلة شرودينجر ψ_I و ψ_{II} خارج الحاجز الذى حصلنا عليه عندما $E < V_0$ ، ولذلك يمكن كتابتهما بالعلاقتين (5.61) . أما فى المجال II ، أى على الحاجز بالذات ، فيمكن الحصول على الحل ψ_{III} من (5.61) بعد إجراء التبديل التالى :

$$\varkappa=ik_1,\qquad k_1=\sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(E-V_0)} \qquad (5.71)$$

لأن $E > V_0$ ، ويمكن أن يحتوى الحل على موجة ساقطة وأخرى منعكسة عن حد الحاجز ($x = a$) . وإذا دمجنا التابعين الموجبين ومشتقاتهما على حدود الحاجز ، تمامًا كما فعلنا عندما $E < V_0$ ، نحصل على صيغة معامل الانعكاس . أى أن :

$$R=|B_1|^2=\frac{|j_{ref}|}{|j_{inc}|}=\frac{(k^2-k_1^2)^2\sin^2 k_1a}{4k^2k_1^2+(k^2-k_1^2)^2\sin^2 k_1a} \qquad (5.72)$$

ويمكن الحصول على هذه النتيجة من العلاقة (5.67) التى تعطى المعامل D بإجراء التبديل (5.71) واستخدام العلاقة التالية :

$$R=1-D \qquad (5.73)$$

وعندما $k_1 = k$ ، أى عندما ينعدم ارتفاع الحاجز الكمونى ($V_0 = 0$) ، نجد أن $D = 1$ و $R = 0$ ، ويعنى ذلك أن الموجة المنعكسة تضمحل ولذلك سيتحرك الجسيم حرًا بامتداد المحور x ، انظر (4.26) ، وعليه نرى فى الميكانيكا الكوانتية أن الموجة المقابلة لجسيم طاقته أعلى من ارتفاع الحاجز

* تبين هذه العلاقة أنه من أجل الحاجز الأملس يكون المعامل $D_0 = 1$ تقريبا (التقريب شبه التقليدى بطريقة $W.K.B.$) .

الكمونى تنعكس جزئيًا ، وتسمى هذه الظاهرة بظاهرة الانعكاس فوق الحاجزى .

و) انتزاع الالكترونات من المعدن . الإصدار البارد . أن لنظرية ظاهرة النفق تطبيقات هامة جدًا فى نظرية المعادن وفى الفيزياء النووية ، فبواسطتها نستطيع تفسير مجموعة من الظواهر لم تستطع الفيزياء التقليدية تعليلها ، منها ظاهرة الإصدار البارد ، وهى عبارة عن انتزاع الكترونات من المعدن تحت تأثير حقل كهربائى وظهور فرق تماسى فى الكمون . ولشرح ذلك نتكلم قليلا عن نظرية « الغاز الالكترونى » التى تعتمد عليها النظرية الالكترونية لناقلية (لموصلية) المعادن ، فمثلا تعنى الناقلية الكهربائية العالية للمعادن أن الالكترونات تستطيع الانتقال بحرية تقريبًا ضمن شبكتها البلورية . ولكن الصعوبة تكمن فى خروج الالكترونات من المعدن إلى الفراغ إذ لابد لذلك من صرف مقدار ما من الطاقة يسمى بشغل الخروج . وهذا يقودنا إلى التفكير بنموذج مبسط للمعدن أى اعتبار الالكترونات فيه غازًا طليقًا يتحرك ضمن حفرة كمونية ينعدم الكمون داخلها (أى داخل المعدن) $V = 0$ أما خارجها فى الفراغ فإن $V = V_0 > 0$. ويمكننا هذا النموذج المبسط من شرح ظواهر كثيرة فى المعادن ، ولهذا يمكن اعتباره فى بعض الأحيان معقولا تمامًا ؛ ولقد أدخل هذا النموذج فى النظرية التقليدية من قبل (نظرية درودى ولورينز وغيرهما) ، إذ درست الالكترونات بطريقة ماكسويل - بولتزمان الإحصائية التقليدية التى فسّرت ظواهر كثيرة فى النظرية الحركية للغازات . ولقد لاقى نموذج « الغاز الالكترونى » صعوبات كبيرة فى النظرية التقليدية أثناء صياغة نظرية السعة الحرارية . ففى الحقيقة ، طبقا للنظرية المعروفة فى الميكانيكا الإحصائية والناصة على أن الطاقة تتوزع بانتظام على درجات الحرية يمكننا أن نكتب طاقة الالكترون الحركية الوسطية بالشكل التالى :

$$E_{av} = {}^3/_2\, k_B T \qquad (5.74)$$

حيث k_B - ثابت بولسمان . ومن هنا نرى أن حصة كل الكترون فى السعة الحرارية الكلية تعادل حصة الذرة الحرة ، أى أن :

$$c_V^{cl} = \frac{\partial E_{av}}{\partial T} = {}^3/_2 k_B.$$

وهذا ما يناقض النتائج التجريبية التى تؤكد أن السعة الحرارية للمعدن أحادى الذرة تتحدد فقط بالسعة الحرارية لذراته فى البلورة أى يمكن إهمال دور الالكترونات الحرة فى تحديد السعة الحرارية للمعدن بالتقريب الأولى ، إلا أن هذا التناقض اختفى على يد العالم زمرفيلد الذى اقترح دراسة الالكترونات لا بالطريقة الإحصائية التقليدية باستخدام تابع التوزيع :

$$f = Ae^{-E/k_B T}$$

وإنما بالطريقة الإحصائية الكوانتية (طريقة فيرمى - ديراك) باستخدام تابع التوزيع :

$$f_{F.-Д.} = \frac{1}{\frac{1}{A} e^{E/k_B T} + 1}$$

وتعتمد طريقة فيرمى - ديراك الإحصائية الكوانتية على مبدأ باولى ، الذى يقول أنه لا يتواجد سوى الكترونين فقط فى كل سوية (حالتين كوانتيتين تختلفان باتجاه المغزلين) . وإذا كانت الحفرة كمونية ثلاثية الأبعاد مكعبة الشكل وطول حرفها L ، فإن مركبات الاندفاع $p = \hbar k$ ترتبط ، وفقا لـ (4.41) ، مع الأعداد الصحيحة n_1, n_2, n_3 الواصفة لسوية الطاقة بالعلاقات التالية :

$$p_x = \frac{2\pi\hbar n_1}{L}, \quad p_y = \frac{2\pi\hbar n_2}{L}, \quad p_z = \frac{2\pi\hbar n_3}{L}$$

وإذا أخذنا بعين الاعتبار أن مجال الواحدة للأعداد الكوانتية $(\Delta n_1 = \Delta n_2 = \Delta n_3 = 1)$

$$\Delta n_1 \cdot \Delta n_2 \cdot \Delta n_3 = \frac{L^3}{8\pi^3 \hbar^3} d^3 p \qquad (5.75)$$

نحصل على سوية طاقة واحدة فقط يمكن أن يقع عليها الكترونان فقط فإننا نجد أنه فى وحدة الحجم تتواجد ρ_0 الكترونا ، ويمكن حساب الاندفاع الأعظمى الذى يحصل عليه الالكترون فى درجة الصفر المطلق ($T = 0$) من العلاقة التالية :

$$\rho_0 = \frac{2}{L^3} \sum \Delta n_1 \cdot \Delta n_2 \cdot \Delta n_3 = \frac{2 \cdot 4\pi}{8\pi^3 \hbar^3} \int_0^{p_{max}} p^2 \, dp = \frac{p_{max}^3}{3\pi^2 \hbar^3} \qquad (5.76)$$

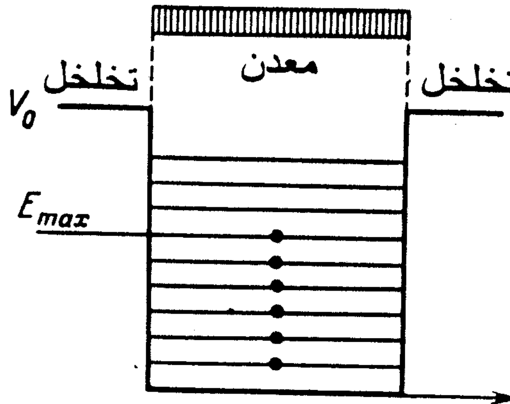
أو

$$P = p_{max} = \hbar \, (3\pi^2 \rho_0)^{1/3} \qquad (5.77)$$

أما الطاقة العظمى للالكترونات فتساوى

$$E_{max} = E_F = \frac{p^2_{max}}{2m_0} = \frac{\hbar^2}{2m_0} (3\pi^2 \rho_0)^{2/3} \qquad (5.78)$$

وتسمى هذه الطاقة العظمى فى الدرجة $T = 0$ بسوية فيرمى أو طاقة فيرمى . ويبين الشكل ٥ ـ ٥ مخططا للسويات الالكترونية المشغولة فى



الشكل ٥ ـ ٥ . نموذج الحفرة الكمونية لمعدن . E_{max} ـ الحد الأعلى للسويات المشغولة عندما $T = 0$ (طاقة فيرمى) .

المعدن . ولنحسب مثلا طاقة فيرمى لمعدن الفضة التى كثافتها 10,5 ووزنها الذرى 107,9 ، بعد أن تعتبر أن عدد الكترونات الحرة يساوى عدد ذرات الفضة فى وحدة الحجم ، أى أن :

$$\rho_0 = \frac{10,5}{107,9} 6,02 \cdot 10^{23} = 5,8 \cdot 10^{22}$$

حيث استعملنا عدد افوكادرو ، أى عدد الذرات فى ذرة غرامية واحدة ، وهو يساوى $6,02 \times 10^{23}$. ومنه نجد بواسطة العلاقة (5.78) أن :

$$E_F = 8,5 \, . \, 10^{-12} \text{erg} = 5,3 \text{ eV}$$

وبما أن شغل الخروج يساوى $W = 3,7 eV$ لذا فإن عمق الحفرة الكمونية للفضة يساوى $9eV$. وإذا طبقنا تعريف القيمة الوسطى لحساب الطاقة الوسطى للالكترون فى المعدن عند الدرجة $T = 0$ نجد العبارة التالية :

$$E^0_{\text{av}} = \frac{2}{\rho_0} \int_0^{p_{\max}} \frac{p^2}{2m_0} \frac{d^3p}{8\pi^3\hbar^3} = \frac{3}{5} E_F \qquad (5.79)$$

وقد برهنت الحسابات الدقيقة من أجل درجة الحرارة المنخفضة جدًا أن $(k_B T \ll E_F)$ وأن السعة الحرارية للغاز الالكترونى هى من رتبة $k_B (k_B T/E_F)$ وتعطى قسطا ضئيلا جدا فى السعة الحرارية الكلية. ونجد من النموذج المدروس ، انظر الشكل ٥ ـ ٥ ، أنه لانتزاع الالكترون من المعدن يجب إمداده بطاقة لا تقل عن شغل الخروج

$$W = V_0 - E_{\max}$$

وعند دراستنا للفعل الضوئى الخارجى تبين أنه بعد أن يأخذ الالكترون من الفوتون الممتص الطاقة $\hbar\omega$ يستطيع الإقلاع من المعدن بطاقة حركية (معادلة أينشتين) قدرها :

$$\frac{1}{2} m_0 v^2 = \hbar\omega - W \qquad (5.81)$$

ومنه نلاحظ أن شغل الخروج هو أصغر طاقة يحتاجها الالكترون لكى تكون طاقته أعلى من ارتفاع الحاجز الكمونى . فإذا كانت درجة حرارة الكترونات

المعدن (الغاز الالكترونى) أعلى من الصفر المطلق فإن قسما منها سيملؤ سويات أعلى من سوية فيرمى . وإذا استطعنا زيادة الطاقة الحركية للغاز الالكترونى بتسخين المعدن فإن طاقة جزء من الالكترونات ستتجاوز طاقة الحاجز الكمونى ولذلك ستخرج الالكترونات على شكل تيار من المعدن ، وقد سميت هذه الظاهرة بالإصدار الحرارى الالكترونى وتستخدم فى الحصول على حزمة الكترونات فى المصابيح الالكترونية . ولكن ظهور تيار الالكترونات أمر جائز حتى فى الدرجات المنخفضة تحت تأثير حقل كهربائى خارجى ثابت ، شدته ع ، يطبق على سطح المعدن باتجاه عمودى عليه . وفى هذه الحالة تكون طاقة الكمون لإلكترون شحنته e_0 ، انظر الشكل ٥ ـ ٦ ، مساوية إلى :

$$V(x) = V_0 - e_0 \mathscr{E} x \qquad (5.82)$$

حيث تؤثر على الالكترون قوة أخرى تضاف إلى قوة الحقل الكهربائى الخارجى تسمى بقوة الخيال الكهربائى ، فالالكترون الذى شحنته e_0 يولّد فى المعدن شحنة محرّضة e_0 ، انظر الشكل ٥ ـ ٧ ، ولهذا نكتب القوة الكلية المؤثرة على الالكترون كما يلى :

$$F(x) = e_0 \mathscr{E} - \frac{e_0^2}{4x^2} \qquad (5.83)$$

أما الطاقة الكامنة الفعالة التى تأخذ بعين الاعتبار قوى الخيال الكهربائى فنكتبها كما يلى :

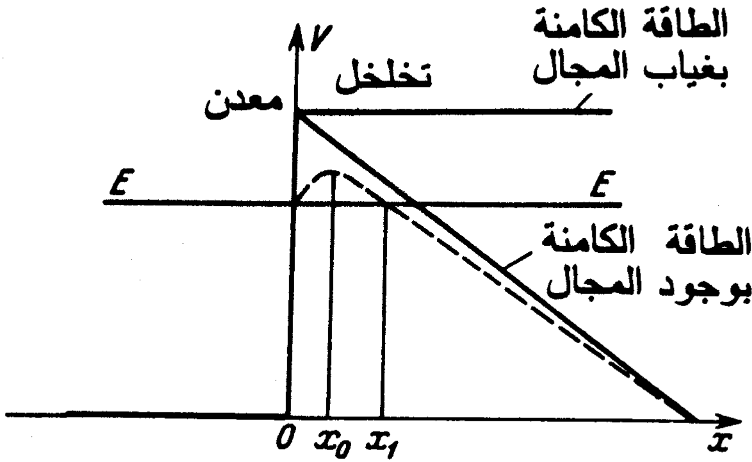
$$V_{eff} = V_0 - e_0 \mathscr{E} x - \frac{e_0^2}{4x} \qquad (5.84)$$

وتبلغ نهايتها العظمى ، فى النقطة x_0 ، التى تحسب من المعادلة التالية :

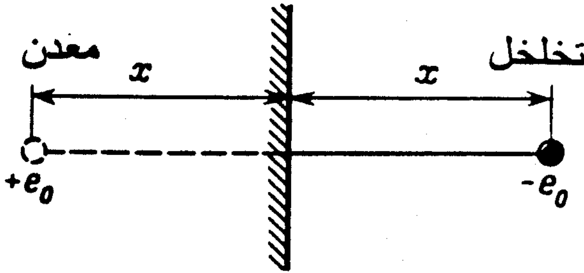
$$\frac{\partial V_{eff}}{\partial x} = - e_0 \mathscr{E} + \frac{e_0^2}{4x_0^2} = 0 \qquad (5.85)$$

ومنه نجد أن :

$$x_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{e_0}{\mathscr{E}}}$$



الشكل ٥ ـ ٦ . الطاقة الكامنة لالكترون فى المعدن بوجود حقل كهربائى خارجى وبغيابه ، إذ يبين الخط المتقطع طبيعة المنحنى الكمونى بوجود قوى الخيال الكهربائى .



الشكل ٥ ـ ٧ . قوى الخيال الكهربائى : إذ يخضع الالكترون خارج المعدن لقوى جانبية بالشحنة المحرضة .

والقيمة العظمى لـ V_{eff} أصغر من V_0 لأن

$$V_{max} = V_0 - \sqrt{e_0^3 \mathscr{E}} \qquad (5.86)$$

ويتضح من ذلك أن شغل الخروج يتناقص بوجود حقل خارجى لقوى الخيال الكهربائى ، أى أن :

$$W' = W - \sqrt{e_0^3 \mathscr{E}} \qquad (5.87)$$

ولكن قوى الخيال الكهربائى غير كافية لتفسير الإصدار البارد ، فمثلا حساب أعظم تيار لمعدن التنغستين عندما $W^1 = 0$ يعطى القيمة التالية :

$$\mathscr{E} = \frac{W^2}{e_0^3} \simeq 2 \cdot 10^8 \ V/\text{cm} \qquad (5.88)$$

بينما تؤكد التجارب ظهور تيار قوى عندما $\xi = 4 \cdot 10^6 \text{V}/\text{cm}$ (تجربة ميليكان) . وهكذا لا نستطيع من وجهة نظر النظرية التقليدية تفسير الناحية الكميّة لظاهرة الإصدار البارد ، أما فى النظرية الكوانتية حيث تستطيع الالكترونات المرور عبر الحاجز الكمونى فيمكن اعتبار الطاقة الكامنة هى تلك المعطاة بالعلاقة (5.82) دون حساب قوى الخيال الكهربائى لأن هذه القوى لا تغير كثيرًا من النتيجة النهائية ، ويمكن أن نلاحظ من الخط البيانى (الشكل ٥ ـ ٦) للطاقة الكامنة أنها تخلق كمونا ذا عرض محدود ، ولذلك يستطيع الالكترون التغلب على هذا الحاجز بسبب ظاهرة النفق ، علمًا أن معامل الشفافية يساوى :

$$D = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_0}\int_0^{x_1}\sqrt{V(x) - E}\, dx\right] \qquad (5.89)$$

حيث يحسب التكامل بامتداد عرض الحاجز من النقطة $x = 0$ حتى النقطة $x = x_1$ التى تتحدّد من العلاقة التالية :

$$V_0 - e_0\mathscr{E}x_1 = E, \qquad x_1 = \frac{V_0 - E}{e_0\mathscr{E}} \qquad (5.90)$$

وعندئذ يكون لدينا :

$$\int_0^{x_1}\sqrt{V(x) - E}\, dx = \int_0^{x_1}\sqrt{V_0 - e_0\mathscr{E}x - E}\, dx =$$

$$= \sqrt{e_0\mathscr{E}}\int_0^{x_1}\sqrt{x_1 - x}\, dx = \frac{2}{3}\sqrt{e_0\mathscr{E}}\, x_1^{3/2} \qquad (5.91)$$

وأخيرًا نحصل لحساب D على العلاقة التالية :

$$D = \exp\left[-{}^4/_3\sqrt{2m_0}\,\frac{(V_0 - E)^{3/2}}{e_0\hbar\mathscr{E}}\right] = \exp\left(-\frac{\mathscr{E}_0}{\mathscr{E}}\right) \qquad (5.92)$$

حيث يتعلق المقدار $\mathscr{E}_0$ بشغل خروج الالكترونات الحرة من المعدن . أما تيار الإصدار البارد فيتناسب مع معامل الشفافية حسب العلاقة التالية :

$$j = j_0 D = j_0 \exp\left(-\frac{\mathscr{E}_0}{\mathscr{E}}\right) \qquad (5.93)$$

ومنه نستنتج أن الإصدار البارد يلاحظ عندما تكون شدة الحقل الكهربائى $\mathscr{E} \sim 10_6$ V/cm وهذا ما يتوافق مع المعطيات التجريبية جيدًا .

ز)**التفكك (الانشطار)ـألفا** . لقد وجدت ظاهرة النفق تطبيقا هاما لها فى نظرية النواة الذرية إذ يعتبر الانشطار ألفا أحد أنواع التحولات التلقائية التى تطرأ على النواة المشعة ، إذ تطلق النواة خلاله جسيما يسمى بالجسيم ـ ألفا أى نواة ذرة الهليوم المؤلفة من بروتونين ونيترونين وتتحول إلى نواة فتية جديدة شحنتها أقل بوحدتين من شحنة النواة الأصلية ، ولقد أصبحت مسألة الانشطار ـ ألفا ، كنظرية اختراق الجسيمات عبر الحاجز الكموى ، إحدى المسائل التقليدية فى ميكانيكا شرودينجر الكوانتية . ولقد أثبتت الأبحاث التجريبية لهذه الظاهرة أنها ناتجة عن الخواص الداخلية للنواة فقط ، ولهذا كان من الطبيعى أن نفترض عدد النوى المنشطرة dN خلال الزمن dt يتناسب طردا مع الفترة الزمنية ومع عدد النوى N فى اللحظة t أى أن :

$$dN = -\lambda N\, dt \qquad (5.94)$$

وبمكاملة هذه المعادلة نحصل على قانون كورى للانشطار الإشعاعى ، أى أن :

$$N = N_0 e^{-\lambda t} \qquad (5.95)$$

ان لثابت الانشطار الإشعاعى ، الموجود فى العبارة السابقة ، معنى الاحتمال لأنه يرتبط بدور نصف الانشطار $T_{1/2}$ ، وهو الزمن الذى ينشطر خلال نصف كمية المادة الأصلية . فإذا رمزنا لكمية النوى الأصلية الرمز N_0 نحصل

من أجل $T_{1/2}$ على العلاقة التالية :

$$N_0 e^{-\lambda T_{1/2}} = \frac{1}{2} N_0 = N_0 e^{-\ln 2} \qquad (5.96)$$

ومنه نجد أن :

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0,693}{\lambda} \qquad (5.97)$$

لقد وضع قانون كورى فى البداية على أسس تجريبية ، ولم يغدُ التفسير النظرى للانشطار ـ ألفا جائزًا إلا بظهور الميكانيكا الكوانتية . ولندرس مباشرة ، وبغض النظر عن آلية تشكل الجسيم ـ ألفا فى عملية انشطار النواة ، الجملة المؤلفة من النواة الفتية والجسيم ـ ألفا . أن الطاقة الكامنة للتأثير المتبادل ، بين الجسيم ـ ألفا (ذى الشحنة $2e_0$) والنواة الفتية [ذات الشحنة $(Z-2)e_0$] ، تتألف من الطاقة الكامنة لقوى التنافر (قوى كولون)

$$V = \frac{2(Z-2)e_0^2}{r} \qquad (5.98)$$

ومن الطاقة الكامنة لقوى الجاذبية النووية التى تفعل فعلها عند المسارات الصغيرة $r \leq R$ أو عند المسافات من المرتبة 10^{-12} cm – 10^{-13} . ويمكن من أجل التقديرات التقريبية صياغة الطاقة الكامنة بالشكل التالى :

$$V = \frac{2(Z-2)e_0^2}{r}, \quad (r > R) \qquad (5.99)$$

$$V = 0, \quad (r < R) \qquad (5.100)$$

ويعتبر الانشطار ـ ألفا من وجهة نظر الميكانيكا الكوانتية ظاهرة نموذجية على اختراق الجسيمات للحاجز الكمونى (1928 غاموف ، كوندون ، هيرنى) .

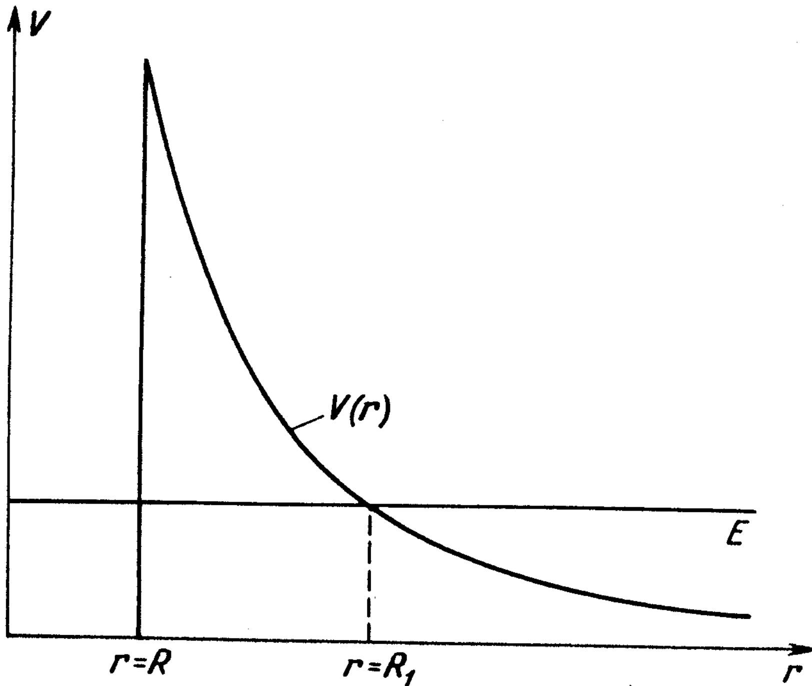
ولبناء نظرية الانشطار ـ ألفا لا بد أولا من ربط ثابت الانشطار

الإشعاعى λ بمعامل شفافية الحاجز ، انظر (5.56) ، أى أن :

$$D = \exp\left(-(2/\hbar)\sqrt{2M}\int_{R}^{R_1}\sqrt{V-E}\,dr\right) \qquad (5.101)$$

حيث M كتلة الجسيم ـ ألفا ، أما R و R_1 ـ فهما بداية الحاجز الكمونى ونهايته ، انظر الشكل ٥ ـ ٨ . وبما أن معامل الشفافية يمثل احتمال اختراق الجسيم للحاجز الكمونى أثناء كل ضربة على جدار الحاجز ، لذا يمكن كتابة قانون الانشطار كما يلى :

$$dN = -\lambda N\,dt = -n\,DN\,dt \qquad (5.102)$$



الشكل ٥ ـ ٨ . مخطط الطاقة الكامنة للجسيم ـ ألفا فى مجال النواة المشعة .

حيث n عدد الضربات فى الثانية الواحدة ، ومن السهل تقدير n من الاعتبارات التالية : لنفترض أن الجسيم ـ ألفا متحرك ضمن حفرة كمونية

نصف قطرها R ، عندها من الواضح أن $n \sim v_0/R$ حيث v_0 سرعة الجسيم ـ ألفا ضمن النواة $(r < R)$. وبسهولة نستطيع أن نربط القيم الأخيرة ببعضها ، فطبقًا لعلاقات اللاتعيين يرتبط اندفاع الجسيم Mv_0 ومكان وجوده R بالعلاقة $Mv_0R \approx \hbar$ ولهذا يكون لدينا :

$$n \approx \frac{\hbar}{MR^2} \qquad (5.103)$$

وإذا اعتمدنا هذه الملاحظات نرى أن العلاقة بين ثابت الانشطار الإشعاعى λ ومعامل الشفافية D تتعين بالمعادلة التالية :

$$\lambda = nD = \frac{\hbar}{MR^2} \exp\left(-\left(\frac{2}{\hbar}\right)\sqrt{2M}\int_R^{R_1}\sqrt{V-E}\,dr\right) \qquad (5.104)$$

وإذا أخذنا لوغاريتم الطرفين نجد أن :

$$\ln\lambda = \ln\frac{\hbar}{MR^2} - \frac{2}{\hbar}\sqrt{2m}\,I \qquad (5.105)$$

حيث

$$I = \int_R^{R_1}\sqrt{V-E}\,dr \qquad (5.106)$$

و R ـ نصف قطر النواة ، أما R_1 فيحسب من شرط تساوى الطاقة الكامنة مع الكلية ، أى أن

$$\frac{2(Z-2)}{R_1}e_0^2 = E \qquad (5.107)$$

وإذا عوضنا العبارة $V = \frac{ER_1}{r}$ بقيمتها فى التكامل (5.106) نجد أن :

$$I = \sqrt{E}\int_R^{R_1}\sqrt{\frac{R_1}{r}-1}\,dr \qquad (5.108)$$

وبتبديل المتحول $r = R_1x^2$ نحصل على أن :

$$I = 2R_1\sqrt{E}\int_{\sqrt{\frac{R}{R_1}}}^{1}\sqrt{1-x^2}\,dx \qquad (5.109)$$

وبإجراء تبديلين آخرين $x = \sin\varphi$ و ، $\sin\varphi_0 = \sqrt{\frac{R}{R_1}}$ نكتب التكامل السابق بالشكل التالى :

$$I = 2R_1\sqrt{E}\int_{\varphi_0}^{\pi/2}\cos^2\varphi\, d\varphi \qquad (5.110)$$

وبمكاملته نحصل :

$$I = \frac{R_1\sqrt{E}}{2}(\pi - 2\varphi_0 - \sin 2\varphi_0) \qquad (5.111)$$

فإذا فرضنا أيضًا أن $\frac{R}{R_1} \ll 1$ يمكننا كتابة φ_0 و I بالشكل التالى :

$$\varphi_0 \approx \sin\varphi_0 = \sqrt{\frac{R}{R_1}}, \quad I = R_1\sqrt{E}\left\{\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{R}{R_1}}\right\} \qquad (5.112)$$

وبحذف R_1 باستخدام العلاقة (5.107) والرمزين التاليين :

$$B = \ln\frac{\hbar}{MR^2} + \frac{8e_0}{\hbar}\sqrt{MR(Z-2)} - \ln\ln 2 \qquad (5.113)$$

$$A = \frac{2\pi(Z-2)e_0^2}{\hbar}\sqrt{2M} \qquad (5.114)$$

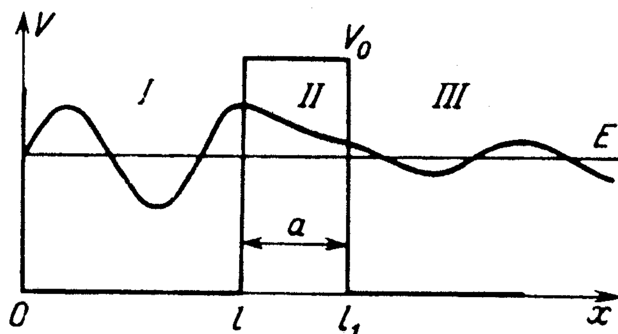
نستخلص لحساب نصف الدور $T_{1/2}$ العلاقة التالية :

$$\ln T_{1/2} = \frac{A}{\sqrt{E}} - B \qquad (5.115)$$

التى تربط بين نصف دور الانشطار $T_{1/2}$ وطاقة الجسيمات ـ ألفا المنطلقة ، والتى تعتبر شكلا معاصرا لقانون غايغر ـ نوتال المعروف ، قبل ظهور الميكانيكا الكوانتية والمستخلص بطريقة تجريبية بحتة . ويبين قانون غايغر ـ نوتال أنه بقدر ما تكون الطاقة E (طاقة انطلاق الجسيمات ـ ألفا من النواة) كبيرة يصغر نصف الدور ، علمًا أنه ثمة ازدياد طفيف فى الطاقة ، مثلا من 4MeV حتى 9MeV (القيمة التقريبية للطاقات القصوى لانطلاق الجسيم ـ ألفا فى فصيلة اليورانيوم المشعة) ، يؤدى إلى نقصان شديد فى متوسط العمر من عدة مليارات من السنين إلى عدة عشرات ملايين

جزء من الثانية ، وبالرغم من أن تغير الطاقة لا يغير كثيرًا من مساحة الحاجز الكمونى ، إلا أن قيمة تغير المساحة تدخل فى الأس الذى يحدد زمن العمر الوسطى .

د) مفهوم أشباه السويات (أشباه الأطياف) . لقد رأينا فى المسألة السابقة عند دراسة الانشطار ـ ألفا أن ثابت الانشطار λ مرتبط مع معامل شفافية الحاجز D وأن الجسيم باختراقه للحاجز الكمونى ينتقل من حالة مقيدة داخل الحفرة الكمونية إلى حالة طليقة خارجها . أما فى الحقيقة فإن الجسيم داخل الحفرة قد لا يكون مقيدًا تمامًا ، ولذلك فإن طيف الطاقة E لن يكون متقطعًا عندما $(\lambda \neq 0)$. وإذا كان احتمال اختراق الجسيم للحاجز صغيرًا ، أى أن يكون ثابت الانشطار $D \sim \lambda$ صغيرًا أيضًا فإن تغير الطيف سيكون طفيفًا ، وفى هذه الحالة نحصل على ما يسمى بالطيف شبه المتقطع المؤلف من أشباه سويات . ولإيجاد أشباه السويات هذه ، ندرس كمثال بسيط حفرة كمونية عرضها a ومحدودة بإحدى الجهات بجدار **لانهائى الارتفاع** $(x = 0)$ ومن الجهة الأخرى $(x = l)$ بحاجز كمونى ارتفاعه V_0 وعرضه $a = l_1 - l$ ، انظر الشكل د ـ ٩ ، وعليه يمكننا أن نكتب التابع الموجى فى المجالات الثلاثة $I\ (0 < x < l)$ و $II\ (l < x < l_1)$ و $III\ (x > l_1)$ كما يلى :



الشكل د ـ ٩ . أشباه السويات .

$$\psi_I = A_1 \sin kx,$$
$$\psi_{II} = A_2 e^{-\varkappa (x-l)} + B_2 e^{\varkappa (x-l)} \qquad (5.116)$$
$$\psi_{III} = A_3 e^{ik(x-l_1)}$$

حيث

$$k^2 = \frac{2m_0 E}{h^2}$$
$$\varkappa^2 = \frac{2m_0}{h^2}(V_0 - E) > 0$$

إذ تم اختيار الحل ψ_I فى المجال الأول بحيث ينعدم ، (عندما $x = 0$) ، ثم اختيار الحل ψ_{III} فى المجال الثالث بحيث يتألف من موجة واحدة تبتعد عن الحاجز مما يكفل ظهور أشباه السويات فى الجملة . ومن شرط استمرار التابع الموجى على حدود الحاجز نجد أنه :

عندما $x = l$

$$A_1 \sin kl = A_2 + B_2$$
$$A_1 \cos kl = \frac{\varkappa}{k}(B_2 - A_2) \qquad (5.117)$$

وعندما $x = l_1$

$$A_2 e^{-\varkappa a} + B_2 e^{\varkappa a} = A_3$$
$$A_2 e^{-\varkappa a} - B_2 e^{\varkappa a} = -\frac{ik}{\varkappa} A_3 \qquad (5.118)$$

ومن المعادلتين الأخريتين نحصل العلاقتين التاليتين :

$$A_2 = \frac{1 - i\frac{k}{\varkappa}}{2} e^{\varkappa a} A_3$$
$$B_2 = \frac{1 + i\frac{k}{\varkappa}}{2} e^{-\varkappa a} A_3 \qquad (5.119)$$

وبتبديلهما فى (5.117) نجد أن :

$$A_1\left(\sin kl + \frac{k}{\varkappa}\cos kl\right) = \left(1 + i\frac{k}{\varkappa}\right) e^{-\varkappa a} A_3$$
$$A_1\left(\sin kl - \frac{k}{\varkappa}\cos kl\right) = \left(1 - i\frac{k}{\varkappa}\right) e^{\varkappa a} A_3 \qquad (5.120)$$

وحتى يكون لهاتين المعادلتين حل غير الصفر يجب أن ينعدم معين أمثالهما ، وعليه نكتب لحساب سويات الطاقة المعادلة التالية :

$$\frac{1+i\frac{k}{\varkappa}}{1-i\frac{k}{\varkappa}}e^{-2\varkappa a}=\frac{\operatorname{tg} kl+\frac{k}{\varkappa}}{\operatorname{tg} kl-\frac{k}{\varkappa}} \qquad (5.121)$$

وبما أن سعة الموجة المبتعدة A_3 أصغر بكثير من سعة الموجة الواردة A_1 فى الحفرة

$$|A_3| \sim A_1 e^{-\varkappa a} \qquad (5.122)$$

لذا ينعدم الحل فى المجال III عندما ($a \to \infty$ و $A_3 = 0$) وعندئذ نجد من (5.120) معادلة لتعيين سويات الطاقة المتقطعة فى الحفرة الكمونية فى المجال I

$$\operatorname{tg} k_0 l = -k_0/\varkappa_0 \qquad (5.123)$$

حيث يرمز الدليل « 0 » لـ $\varkappa$ و k عندما $a \to \infty$. ولنبرهن أنه عندما تكون الحدود الأسية صغيرة من المرتبة $e^{-2\varkappa a}$ وعندما يتحقق الشرطان $\varkappa a \gg 1$ و $\varkappa l \gg 1$ فإن حل المعادلة (5.121) سيصف أشباه السويات ، لذا نعزل فى المقدار k جزءًا عقديًا صغيرًا k' ونهمل فى القسم الحقيقى الحدود الصغيرة جدًا لعدم أهميتها ، وعليه يكون لدينا :

$$k = k_0 - ik' \qquad (5.124)$$

حيث ترتبط k_0 مع طيف الطّاقة المتقطع بالعلاقة التالية :

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_0} = \frac{m_0 v^2}{2} \qquad (5.125)$$

وبتبديل العلاقة (5.124) فى المعادلة (5.121) وملاحظة المساواة (5.123) والشرط $\varkappa l >> 1$ ، نجد أن

$$k'l = + \frac{4\left(\frac{k_0}{\varkappa_0}\right)^2}{\left[1+\left(\frac{k_0}{\varkappa_0}\right)^2\right]^2} e^{-2\varkappa a} \qquad (5.126)$$

وعندئذ نعبّر عن الطاقة بالصيغة التالية :

$$E = E_0 - \frac{1}{2} i\hbar\lambda \qquad (5.127)$$

حيث

$$\lambda = D_0 \frac{v}{2l} \exp\left[-2a\sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(V_0 - E_0)}\right] \qquad (5.128)$$

أما المقدار D_0 فيساوى

$$D_0 \simeq \frac{16\left(\frac{k_0}{\varkappa_0}\right)^2}{\left[1+\left(\frac{k_0}{\varkappa_0}\right)^2\right]^2} \qquad (5.129)$$

إن وجود القسم العقدى (المركب) فى صيغة الطاقة (5.127) يشهد على أن التابع الموجى فى الحفرة الكمونية سيتناقص بالنسبة للزمن وفق قانون أسى . أما فى الواقع فإننا نحصل من أجل مربع القيمة المطلقة للتابع الموجى ، انظر (5.95) ، على ما يلى :

$$|\psi|^2 = \text{const}\, e^{-\lambda t} \qquad (5.130)$$

أى أن λ ـ ثابت الانشطار سيصف احتمال وجود الجسيم داخل الحفرة الكمونية . أما فى خارج الحفرة ، كما نرى من ψ_{III} فى المساواة (5.116) فيجب أن يتزايد الحل عند الابتعاد عن الحفرة ($x \to \infty$) على حساب التصحيح العقدى الصغير الذى أدخل على العدد الموجى k' ، انظر (5.126) وعليه يكون لدينا :

$$|\psi_{III}|^2 = \text{const}\, e^{2k'x} \qquad (5.131)$$

ولهذا يتباعد تكامل المعايرة للتابع ψ عند قيم x الكبيرة ولكن هذا الازدياد

يحدث عندما $x \to -\infty$ ويعوض بالتناقص الأسى عندما $t \to \infty$ طبقًا للمساواة (5.130) وهذا ما يكفل تحقيق معادلة الاستمرارية (2.20) . ولبرهان ذلك نحسب تيار الموجة المارة $_{III}$ طبقًا لـ (5.54) فنجد أن :

$$j = \frac{\hbar}{2m_0}(k + k^*) | \psi_{III} |^2 = \frac{\hbar k_0}{m_0} \rho = \rho v$$

حيث $\rho = | \psi_{III} |^2$ الكثافة الاحتمالية ، وعليه وبناء على (5.131) نجد أيضًا أن :

$$\frac{\partial j}{\partial x} = v \frac{\partial \rho}{\partial x} = 2 v k' \rho$$

وينتج من (5.130) أن :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \lambda \rho$$

وإذا أخذنا بعين الاعتبار (5.126) و (5.128) نجد أن :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = (- \lambda + 2k'v) \rho = 0$$

وبالتالى تتحقق معادلة الاستمرارية وهذا ما توقعناه . فيما تمكننا العلاقة (5.128) من أجل الثابت λ من حساب معامل شفافية الحاجز D . فى الحقيقة توجد علاقة بين λ و D هى تلك التى استخرجت فى مسألة الانشطار - ألفا ، أى أن :

$$\lambda = \frac{v}{2l} D \qquad (5.132)$$

حيث $\frac{v}{2l}$ هى عدد الضربات على الحاجز فى وحدة الزمن ، ومنه نجد لحساب D العبارة التالية :

$$D \simeq D_0 \exp[- 2 (a/\hbar) \sqrt{2m_0 (V_0 - E_0)}] \qquad (5.133)$$

ولقد حصلنا على هذه القيمة سابقًا بطريقة أخرى عند حل مسألة الاختراق عبر حاجز مستطيل ، انظر (5.69) .

البند ٦ ـ الطبيعة الإحصائية للميكانيكا الكوانتية

أ) **القيم الوسطية للمؤثرات** . من المعلوم فى النظرية الكلاسيكية أن حركة أية نقطة مادية تتعين تمامًا بمعرفة تغيّر أحداثياتها بالنسبة للزمن . ويتم تحديد هذه الحركة بشكل متباين بتطبيق قانون نيوتن الأساسى :

$$m_0 \ddot{r} = -\text{grad } V(r) \qquad (6.1)$$

ومعرفة الشروط الابتدائية . وعندما نحسب r بدلالة الزمن نستطيع معرفة كل من اندفاع النقطة المادية وطاقتها.وقد يتغير الأمر بعض الشىء عند دراسة حركة جسيمات كثيرة ، فى النظرية الحركية للغازات مثلا ، حيث تظهر قانونية إحصائية ناتجة عن عدد الجسيمات الضخم . وفى هذه الحالة يبدو أن للجسيمات قانون توزع معين ، سواء فى الفراغ الاحداثى أو فى فراغ الاندفاع . ولذلك نستطيع التحدث عن احتمال هذه القيمة أو تلك للاحداثى أو للاندفاع ، ويعنى ذلك أنه يوجد تابع التوزع f الذى يمكننا من حساب القيمتين الوسطيتين لكل منهما بالشكل التالى :

$$\bar{x} = \int x f d^3x d^3p, \qquad \bar{p}_x = \int p_x f d^3x d^3p \qquad (6.2)$$

أو حساب متوسطى مربعى هذين المقدارين :

$$\overline{x^2} = \int x^2 f d^3x d^3 p \ldots \text{etc} \ldots$$

اللذين يجب أن يتطابقا ، حسب قانون الأعداد الكبيرة للجسيمات ، مع القيمتين المقابلتين تجريبيًا . ولندرس إحدى خواص القانونية الإحصائية التى تظهر فى النظرية الكلاسيكية نتيجة حساب القيمة الوسطى لما يسمى بالوسيط المستتر الذى يحدد حركة كل جسيم بدقة طبقًا لمعادلة نيوتن ، علمًا أن الوسطاء المستترة لا تدخل فى النتيجة النهائية . وتسمح النظرية

الكلاسيكية نظريًا على الأقل (ولو كان هذا معقدًا جدًا من الناحية الرياضية) ، بمعرفة سبب انحراف احداثيات واندفاعات كل جسيم عن القيمة الوسطى فى كل لحظة من الزمن أما فى العالم المجهرى فيوصف سلوك الجسيمات الدقيقة بتابع $\psi(r,t)$ خواصه احتمالية أيضا ، حتى عند وصف حركة جسيم وحيد . ولهذا فإنه فى الميكانيكا الكوانتية يتم حساب القيم الوسطى للمقادير الفيزيائية سواء لجسيم واحد أو لعدة جسيمات . وينبغى التأكيد أننا لا نستطيع ، ضمن حدود الميكانيكا الكوانتية ، من حيث المبدأ تفسير انحراف القيم التجريبية عن القيم الوسطية* ، وعليه فإن القيم الوسطى فى الميكانيكا الكوانتية تحسب بطريقة مشابهة لما فى النظرية الإحصائية ، أى بالعلاقة التالية :

$$\overline{M} = \int \psi^* (t)\, M\, \psi (t)\, d^3 x \qquad (6.3)$$

حيث يمكن أن يكون M أى مؤثر (أو أى عدد) ، ويمثل المقدار $\psi^*(t)\,\psi(t)$ تابع التوزع f .

وبناء على ذلك تكتب المتوسطات فى الميكانيكا الكوانتية بواسطة أقواس زاوية وهذا ما سنفعله نحن من الآن فصاعدًا ، وعليه نكتب (6.3) بالشكل التالى :

$$\langle M \rangle = \int \psi^* (t)\, M \psi (t)\, d^3 x \qquad (6.4)$$

وعندما يتعلق الأمر بالمتوسط التقليدى سنرمز له بخط صغير فقط .

إن القيم الوسطى للاحداثيات والاندفاعات هى أعداد يمكن حسابها بقانون واحد ، أى أن :

---

* لقد برهن فون نيمان أنه لا توجد وسطاء مستترة فى أسس القانونية الاحصائية للميكانيكا الكوانتية ، إلا أن برهانه هذا بقى فى حيز الميكانيكا الكوانتية ذاتها ، ولم يغد معمما أو مطلقا .

$$\langle x\rangle = \int \psi^*(t)\, x\psi(t)\, d^3x$$

$$\langle p_x\rangle = \int \psi^*(t)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(t)\, d^3x \qquad (6.5)$$

وذلك بالرغم من أن x عدد و $\frac{\partial}{\partial x}$ مؤثر اشتقاق . وعليه يكون $\langle x \rangle$ احداثيات مركز ثقل الرزمة الموجية و $\langle p_x \rangle$ اندفاع هذا المركز . ولكى تقابل المتوسطات السابقة مقادير فيزيائية ينبغى أن تكون قبل كل شىء أعدادًا حقيقية

$$\langle M \rangle^* = \langle M \rangle \qquad (6.6)$$

أى أن :

$$\int \psi^* M\psi d^3x = \left(\int \psi^* M\psi d^3x\right)^* \qquad (6.7)$$

وهذا ما يفرض على المؤثر نفسه تحقيق شروط أخرى لا بد لشرحها من تعريف المؤثر الهيرميتى* المقترن ، ولذلك ندرس التكامل المتقارب التالى :

$$\int \chi^* M\varphi d^3x \qquad (6.8)$$

حيث φ و χ ـ تابعان اختياريان يحققان شروط حدية حسب نوع المؤثر M .

ولنعرف المؤثر الهيرميتى المقترن M^+ بالمعادلة التالية :

$$\int \chi^* M\varphi d^3x = \int (M^+\chi)^* \varphi d^3x \qquad (6.9)$$

وعندما يتطابق المؤثر M مع المؤثر الهيرميتى المقترن M^+ $(M = M^+)$ فإن

$$\int \chi^* M\varphi\, d^3x = \int (M\chi)^* \varphi d^3x \qquad (6.10)$$

---

* هيرميتى ، نسبة للعالم هيرميت ، وتعنى هذه الصفة أن المؤثر لا نهائى البعد فى التحويلات الخطية . « المراجع » .

ويسمى المؤثر M عندئذ بالمقترن ذاتيًا (أو بالهيرميتى) . وإذا وضعنا فى المساواة الأخيرة $\bar{\psi} = \chi = \varphi$ نحصل على الشرط (6.7) . وعليه نستنتج أنه إذا كان المؤثر هرميتيا ، أى

$$M = M^{+} \qquad (6.11)$$

فإن القيم الوسطية ، كما ينتج من المعادلتين (6.7) و (6.6) ستكون مقادير حقيقية . ولنبرهن الآن أن المؤثر p_x يحقق الشرط (6.7) أو (6.11) بالرغم من أن شكله الخارجى عقدى خالص . ولذلك سنبرهن نظرية هامة ، سنستعملها فيما بعد ، تتعلق « بنقل » المشتقة وتتلخص فيما يلى : إذا كان لدينا التكامل

$$G = \int_{-\infty}^{\infty} uv^{(n)}\,dx \qquad (6.12)$$

حيث $v^{(n)} = d^n v/dx^n$ ، وإذا انعدمت الحدود التى من الشكل :

$$[uv^{(n-1)}]_{-\infty}^{\infty},\quad [u^{(1)}v^{(n-2)}]_{-\infty}^{\infty},\quad \ldots,\quad [u^{(n-1)}v]_{-\infty}^{\infty} \qquad (6.13)$$

فإن نتيجة التكامل G لا تتغير إذا « نقلنا » الاشتقاق من التابع v إلى التابع u ووضعنا المضروب $(-1)^n$ أمام التكامل ، أى

$$\int_{-\infty}^{\infty} uv^{(n)}\,dx = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} u^{(n)}v\,dx \qquad (6.14)$$

وفى الحقيقة ، إذا أجرينا التكامل (6.12) n مرة بالتجزئة مع ملاحظة القيم الصفرية (6.13) فإننا سنحصل على العلاقة (6.14) . وتتحقق العلاقة (6.13) دائمًا فى حالة الطيف المتقطع لأن التابع الموجى يتناقص فى اللانهاية بقانون أسى ، أما فى حالة الحركة الطليقة (الطيف المستمر) فتنعدم (6.13) بسبب شرط الدورية . وعليه فإن المعنى الفيزيائى لـ (6.13) هو أنه لا توجد فى اللانهاية أية جسيمات أو تيارات .

لنعد الآن إلى برهان الاقتران الذاتى للمؤثر $p_x = -i\hbar\partial / \partial x$ ولهذا نفترض فى المعادلة (6.14) أن :

$$u = \psi^*(t), \quad v = -i\hbar\psi(t), \quad n = 1$$

ومنه نستنتج أن :

$$\langle p_x \rangle = -\int \psi^*(t)\, i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(t)\, dx = \int \psi(t)\, i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(t)\, dt = \langle p_x \rangle^*$$

إذن ، فالمؤثر p_x يحقق الشرط الهرميتى ، بينما نرى ، على العكس من ذلك أن المؤثر الحقيقى $\partial/\partial x$ ليس هرميتيًا وليس لقيمته الوسطى أى معنى فيزيائى . وإذا كانت للمؤثر M قيمة خاصة واحدة λ (وتابع خاص واحد ψ) فمن السهل البرهان أن λ تتطابق مع القيمة الوسطى لهذا المؤثر ، وفى الحقيقة إذا لاحظنا التعريف العام (6.12) للقيمة الوسطى للمؤثر واعتبرنا أن :

$$M\psi = \lambda\psi \qquad (6.15)$$

نجد أن :

$$\langle M \rangle = \int \psi^* M \psi d^3x = \lambda \int \psi^* \psi d^3x = \lambda$$

واذا فرضنا الآن أن للمؤثر M فى المعادلة (6.15) عددا من القيم الخاصة $\lambda_1, \lambda_2, \ldots \lambda_n, \ldots,$ مقابلة للتوابع الموجية ... $\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_n,$ فسنقبل أنه فى الميكانيكا الكوانتية يمكننا أن نحصل على القيم الخاصة λ_n للمؤثر M عند إجراء القياسات الدقيقة للمقدار الفيزيائى المقابل .

لنفترض أن الجملة الكوانتية تقع فى حالة ما موصوفة بالتابع الموجى ψ ، فما هو احتمال الحصول على إحدى القيم الخاصة λ_n عند قياس المقدار الفيزيائى M ؟ وللإجابة على هذا السؤال يجب نشر التابع الموجى ψ وفق سلسلة من التوابع الخاصة ψ_n للمؤثر M ، أى أن :

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n \qquad (6.16)$$

وهذا مشابه للنشر وفق سلسلة فورييه حيث تكون التوابع ψ_n توابع خاصة لمؤثر الاندفاع . عادة ما يفترض فى الميكانيكا الكوانتية ، أن التوابع الخاصة لأى مؤثر تكفل صحة النشر السابق لأى تابع اختيارى ، ويمكن أن نبرهن هذه الخاصة ، التى تسمى بخاصة الاكتمال ، بدقة رياضيًا . ان لعوامل النشر ψ_n فى (6.16) معنى فيزيائيًا محددا لأن مربعاتها أى $|C_n|^2$ تتناسب مع احتمال القيمة الخاصة λ_n عند القياس . ومن السهل البرهان على أن التوابع الموجية للمؤثرات الهيرميتية المقابلة للقيم الخاصة المختلفة ستكون متعامدة ، (لقد فعلنا ذلك لمؤثر هاملتون فى البند ٣)

$$M\psi_n = \lambda_n\psi_n, \quad M\psi_{n'} = \lambda_{n'}\psi_{n'} \tag{6.17}$$

حيث $\lambda_n \neq \lambda_{n'}$. ومن أجل المؤثر الهيرميتى $M = M^+$ يمكننا أن نكتب (أنظر (6.9) و (6.10)) ما يلى :

$$\int \psi_n^* M\psi_{n'} d^3x = \int (M\psi_n) \; \psi_{n'} d^3x$$

وبالاستناد إلى (6.17) نجد أن :

$$(\lambda_n - \lambda_{n'}) \int \psi_n^* \psi_{n'} d^3x = 0$$

وبما أن $\lambda_n \neq \lambda_{n'}$ ، إذن :

$$\int \psi_n^* \psi_{n'} d^3x = 0 \quad n \neq n'$$

وإذا عايرنا التوابع الخاصة على الواحد فيمكن كتابة شرط التعامد والمعايرة بواسطة رمز كرونيكر كما يلى :

$$\int \psi_n^* \psi_{n'} d^3x = \delta_{nn'} \tag{6.18}$$

وطبقًا لهذا الشرط ستكون قيمة تكامل مربع القيمة المطلقة للتابع الموجى ψ المنشور بالعلاقة (6.16) كالتالى :

$$\int |\psi|^2 d^3x = \sum_n |C_n|^2$$

وعندما يكون التابع ψ معايرًا على الواحد سنجد أن :

$$\sum_n |C_n|^2 = 1$$

وهذا ما يقابل الاحتمال الكلى لوجود الجملة فى الحالات ψ_n ، وعليه فإن $|C_n|^2$ يمثل احتمال للقياسات الممكنة للمقدار الفيزيائى المساوية لـ λ_n . فإذا حسبنا الآن القيمة الوسطى للمقدار M فى الحالة ψ ، فإننا سنحصل ، طبقًا للعلاقة العامة (6.4) وبملاحظة النشر (6.16) والشروط (6.18) ، على ما يلى :

$$\langle M\rangle = \int \psi^* M\psi d^3x = \sum_n \lambda_n |C_n|^2 \qquad (6.19)$$

وتثبت هذه المساواة مرة أخرى صحة الطبيعة الاحتمالية للعوامل C_n فى النشر (6.16) .

ب) استنتاج علاقات اللاتعيين (الشك) . لقد بينا فى الفقرة السابقة أن القيم الفيزيائية الملموسة ، أى تلك التى يمكن قياسها ، هى التى تتميز رياضيًا بقيمة وسطية يمكن أن تحسب بالعلاقة (6.4) . ولنبرهن أولا أنه إذا تواجد مقداران فيزيائيان مقابلان لمؤثرين غير تبديليين فإنهما لا يمكن أن يقاسا معًا بدقة فى أطر الميكانيكا الكوانتية . وإن أهم شىء فى الموضوع هو حساب الانحراف عن القيم الوسطية للمؤثرين المقترنين قانونيًا : الاحداثى x والاندفاع p_x . وسنقتصر دراستنا على الحالة المستقرة (أى عندما لا يتعلق التابع الموجى بالزمن) ، لذلك نستطيع حساب القيمتين الوسطيين للاحداثى والاندفاع من العلاقتين :

$$\langle x\rangle = \int \psi^* x\psi d^3x \qquad (6.20)$$
$$\langle p_x\rangle = \int \psi^* \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x} d^3x$$

وبالرغم من أن الخطأ الوسطى ، أو الانحراف عن القيمة الوسطية ، يساوى الصفر أى :

$$\langle \Delta x \rangle = \int \psi^* (x - \langle x \rangle)\, \psi d^3x = \langle x \rangle - \langle x \rangle = 0 \qquad (6.21)$$

هذا لا يعنى عدم إمكانية تواجد الجسيم فى أمكنة مختلفة عن $\langle x \rangle$ ، لأن الانحرافات بالنسبة لمركز الثقل $\langle x \rangle$ يمكن أن تحدث بإشارتين مختلفتين ولذلك يمكن أن يكون مجموعها مساويًا للصفر . ولهذا يجب تمييز الانحراف عن القيمة الوسطى بحساب متوسط مربع الخطأ الذى ستكون إشارته موجبة فى أى انحراف ، ويمكن حساب متوسط مربع الخطأ فى الاحداثى (تشتت) بالعلاقة التالية :

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \int \psi^* (x - \langle x \rangle)^2\, \psi d^3x =$$
$$= \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle^2 + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \qquad (6.22)$$

ويعنى انعدام متوسط مربع الخطأ $\langle (\Delta x)^2 \rangle = 0$ أن احتمال تواجد الالكترون يساوى الصفر فى كل الفراغ ما عدا النقطة $\langle x \rangle = x$. وفى هذه الحالة تتساوى القيمة الوسطى مع القيمة الصحيحة ، أى أن الاحتمال المقابل لوجود الجسيم سيوصف بالتابع δ . وبالطريقة نفسها يحسب متوسط مربع الخطأ فى الاندفاع ، أى أن :

$$\langle (\Delta p_x)^2 \rangle = \int \psi^* (p_x - \langle p_x \rangle)^2\, \psi d^3x = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2 \qquad (6.23)$$

ولكى نستخلص العلاقة بين $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ و $\langle (\Delta p_x)^2 \rangle$ يمكننا ، حتى فى الحالة العامة ، اختيار جملة إحداثية مركزها فى مركز ثقل الرزمة الموجية $(\langle x \rangle = 0)$ بحيث تتحرك مع هذا الأخير $(\langle p_x \rangle = 0)$ وفى هذه الحالة يكون لدينا:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = \int \psi^* x^2 \psi d^3x,$$
$$\langle (\Delta p_x)^2 \rangle = \langle p_x^2 \rangle = \int \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi d^3x. \qquad (6.24)$$

ثم نحسب التكامل

$$I(\alpha) = \int \left(\alpha x \psi^* + \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)\left(\alpha x \psi + \frac{\partial \psi}{\partial x}\right) d^3x \qquad (6.25)$$

حيث α ـ ثابت اختيارى حقيقى لا يتعلق بـ x . كما يمكن كتابة التكامل السابق أيضًا بالشكل التالى :

$$I(\alpha) = A\alpha^2 - B\alpha + C \qquad (6.26)$$

حيث

$$A = \int \psi^* x^2 \psi d^3x = \langle x^2 \rangle > 0$$

$$B = -\int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} x\psi + x\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) d^3x =$$

$$= -\int x \frac{\partial \psi^* \psi}{\partial x} d^3x = \int \psi^* \psi d^3x = 1 \qquad (6.27)$$

$$C = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} d^3x = \frac{1}{\hbar^2} \int \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \psi \, d^3x = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{\hbar^2} > 0$$

وبما أن العبارة الخاصة للتكامل فى (6.25) موجبة أو معدومة لذا يكون لدينا :

$$I(\alpha) \geqslant 0 \qquad (6.28)$$

ان الشرط (6.28) يستلزم قيودًا أخرى على العوامل A, B, C ، وبالفعل إذا تحققت (6.28) من أجل القيمة $\alpha = \alpha_0$ الموافقة للنهاية الصغرى للتابع $I(\alpha)$ فإنها ستتحقق مهما كانت القيمة الحقيقية لـ α ، أما α_0 نفسها فتحسب من الشرط

$$I'(\alpha_0) = 2A\alpha_0 - B = 0, \qquad \alpha_0 = \frac{B}{2A}$$

$$I''(\alpha_0) = 2A > 0$$

وعليه ، فإن القيمة الصغرى لـ $I(\alpha)$ هى :

$$I_{\min} = I(\alpha_0) = -\frac{B^2}{4A} + C \geqslant 0 \qquad (6.29)$$

ومن هنا ينتج أن المتراجحة (6.28) تتحقق من أجل كل القيم الحقيقية لـ α إذا تحقق الشرط التالى :

$$B^2 \leqslant 4AC$$

فإذا بدلنا A, B, C بقيمتهم فى (6.27) وأخذنا بعين الاعتبار (2.24) ، نجد العلاقة التى تربط بين $\langle (\Delta p_x)^2 \rangle$ و $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ أى أن :

$$\langle(\Delta x)^2\rangle \langle(\Delta p_x)^2\rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4} \qquad (6.30)$$

وتعبر هذه المتراجحة عن علاقة اللاتعيين (الشك) . وإذا لاحظنا أن* $p_x x - x p_x = -i\hbar$ يمكن كتابة العلاقة الأخيرة بالشكل التالى :

$$\langle(\Delta x)^2\rangle \langle(\Delta p_x)^2\rangle \geqslant \frac{1}{4} \langle | p_x x - x p_x |^2\rangle \qquad (6.31)$$

وبتعميم النتيجة الأخيرة نستطيع القول بصورة عامة أنه عندما يتواجد مؤثران غير تبديليين M_1 ، M_2 ، لا بد أن تتحقق دائمًا العلاقة التالية :

$$\langle(\Delta M_1)^2\rangle \langle(\Delta M_2)^2\rangle \geqslant \frac{1}{4} \langle | M_1 M_2 - M_2 M_1 |^2\rangle \qquad (6.32)$$

حيث

$$\langle(\Delta M_i)^2\rangle = \int \psi^* (M_i - \langle M_i \rangle)^2 \psi d^3x, \qquad (i = 1, 2) \qquad (6.33)$$

أن علاقة اللاتعيين (الشك) هى نتيجة للنظرة الازدواجية الجسيمية

---

* يمكن البرهان على أن المؤثرين x ، p_x غير تبديليين بواسطة المساواة التالية :

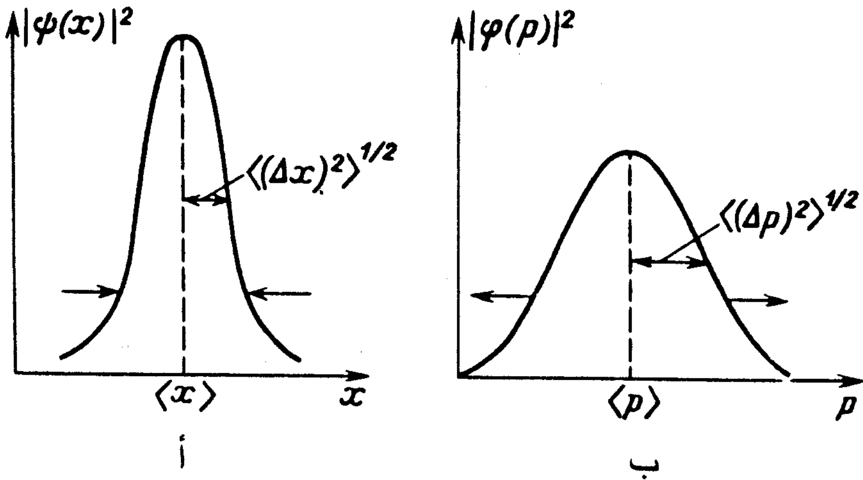
$$x p_x \psi = - i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad p_x x \psi = - i\hbar \frac{\partial x \psi}{\partial x} = - i\hbar \left(1 + x \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi$$

ومنه نجد أن $(p_x x - x p_x)\psi = - i\hbar\psi$ أو بصيغة المؤثرات :

$$p_x x - x p_x = - i\hbar \qquad (6.30a)$$

الموجية الموجودة فى أساس الميكانيكا الكوانتية ، ومستقلة عن المجرب وملاحظاته ، لأن التجارب يمكن أن تثبت النتائج النظرية فقط .

إن معنى علاقة الشك يتلخص فى أن توزعات الكثافة بالنسبة لمتغيرين يقابلان مؤثرين غير تبديلين ، لا يستطيعان من حيث المبدأ أن يأخذا شكل التابع δ ، انظر الشكل (٦ ـ ١) أضف إلى ذلك أنه بقدر ما يقترب التوزع الاحتمالى فى فراغ أحد المتغيرين من التابع δ ، يتسع هذا التوزع فى فراغ المتغير الآخر . وفى الحالة عندما يأخذ التوزع فى الفراغ الاحداثى x ، أى $|\psi(x)|^2$ ، شكل التابع ـ δ أى $[\langle(\Delta x)^2\rangle = 0]$ يصبح التوزع فى الفراغ الاندفاعى p_x ، أى $|\varphi(p_x)|^2$ ، مقدارًا ثابتًا من أجل كل قيم p_x أى $\langle(\Delta p_x)^2\rangle = \infty$.



الشكل ٦ ـ ١ . توزع كثافة الاحتمال فى الفراغين الاحداثى (أ) والاندفاعى (ب) :

$$\langle(\Delta x)^2\rangle \langle(\Delta p)^2\rangle)^{1/2} = \frac{\hbar}{2}$$

وعليه ، إذا تضيق التوزع فى الفراغ الاحداثى (a) فإن التوزع فى الفراغ الاندفاعى (b) سيتسع .

جـ) أقواس بواصون الكلاسيكية والكوانتية . من المعلوم فى الميكانيكا الكلاسيكية أن حالة الجملة المادية تتعين بما يسمى بالمتغيرات الديناميكية لجملة موصوفة بتابع هاملتون $H(x_i, p_i, t)$ ، تتعلق عادة بالاحداثيات x_i والاندفاعات p_i والزمن t أى $f = f(x_i, p_i, t)$. وعند ذلك يحقق كل من المتغيرات x_i ، p_i معادلات هاملتون القانونية :

$$\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \tag{6.34}$$

ويحسب تغير المقدار f بالنسبة للزمن استنادًا إلى (6.34) بالعلاقة التالية :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\}_{cl} \tag{6.35}$$

حيث تسمى العبارة

$$\{H, f\}_{cl} = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial f}{\partial x_i} - \frac{\partial H}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial p_i} \right) \tag{6.36}$$

بأقواس بواصون الكلاسيكية . وإذا كان التابع f مستقلا عن الزمن بصورة صريحة فإن $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$ ، عندئذ يتحدد تغير f تمامًا بواسطة أقواس بواصون ، أى أن :

$$\frac{df}{dt} = \{H, f\}_{cl} \tag{6.37}$$

وعندما تنعدم هذه الأخيرة ($\{H, f\}_{cl} = 0$) يكون المقدار f مستقلا عن الزمن ، ويعنى ذلك أنه سيكون مصونا ، أى أن :

$$f = \text{const} \tag{6.38}$$

فمثلا عندما تكون الطاقة مستقلة عن الزمن بصورة صريحة ، تكون $\partial H/\partial t = 0$ ، وعليه فإن $\{H,H\}_{cl} = 0$ ولذلك سيكون تابع هاملتون (أى الطاقة فى حالتنا هذه) مقدارًا ثابتًا ($H = \text{const}$) . ولنلاحظ أيضًا أنه إذا بدلنا f فى (6.37) بالاحداثى x_i ثم بالاندفاع p_i فإننا نحصل على

المساواة (6.34) أو على معادلات هاملتون القانونية من جديد . لنعمم أقواس بواصون الكلاسيكية على الحالة الكوانتية ، ولذلك نلاحظ قبل كل شيء أن القيم الوسطى للمؤثرات فقط هي التي تملك معنى فيزيائيًا في الميكانيكا الكوانتية ، بينّا ذلك في الفقرة (أ) ، ولذلك سنحسب تغير هذه القيم بالنسبة للزمن . فالقيمة الوسطى لأى مؤثر f فى الحالة العامة يمكن أن تحسب بالمعادلة (6.3) التى يدخل فيها الزمن كبارامتر فقط وباستنادنا إليها نستطيع حساب المشتقة الكلية $\langle f \rangle$ بالنسبة للزمن كما يلى :

$$\frac{d\langle f\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\int \psi^*(t)\, f\psi(t)\, d^3x = \int \psi^*(t)\frac{\partial f}{\partial t}\psi(t)\, d^3x + \\ + \int \frac{\partial \psi^*(t)}{\partial t} f\psi(t)\, d^3x + \int \psi^*(t)\, f\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}\, d^3x \qquad (6.39)$$

وإذا عوضنا عن $\frac{\partial\psi^*(t)}{\partial t}$ و $\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}$ بقيمتيهما على الترتيب من معادلة شرودينجر ، أى بالعبارتين $\frac{i}{\hbar}(H\psi)^*$ و $-\frac{i}{\hbar}H\psi$ يمكننا أن نكتب العلاقة (6.39) بالشكل التالى :

$$\frac{d\langle f\rangle}{dt} = \int \psi^*(t)\frac{\partial f}{\partial t}\psi(t)\, d^3x + \\ + \frac{i}{\hbar}\int [(H\psi(t))^*(f\psi(t)) - \psi^*(t)\, f\,(H\psi(t))]\, d^3x \qquad (6.40)$$

حيث

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V \qquad (6.41)$$

وبالاستفادة من الشرط الهيرميتى للمؤثر H ، انظر (6.10) ، نجد أن :

$$\int (H\psi(t))^*(f\psi(t))\, d^3x = \int \psi^*(t)\, Hf\psi(t)\, d^3x \qquad (6.42)$$

وعليه نعيّن تغيّر $\langle f \rangle$ بالنسبة للزمن من العلاقة التالية :

$$\frac{d\langle f\rangle}{dt} = \left\langle\frac{\partial f}{\partial t}\right\rangle + \frac{i}{\hbar}\int \psi^*(t)\,(Hf - fH)\,\psi(t)\, d^3x = \\ = \left\langle\frac{\partial f}{\partial t}\right\rangle + \langle\{H,\ f\}_{qu}\rangle \qquad (6.43)$$

حيث تمثل العبارة

$$\{H, f\}_{qu} = \frac{i}{\hbar}(Hf - fH) = \frac{i}{\hbar}[H, f] \quad (6.44)$$

تعميمًا لأقواس بواصون التقليدية (6.36) ، على الحالة الكوانتية ولهذا تسمى بأقواس بواصون الكوانتية ، أما المقدار المرتبط بها

$$[H, f] = Hf - fH$$

فيسمى بمبدّل المؤثرين H و f ويكتب بصورة عامة للمؤثرين B, A

$$[A, B] = AB - BA$$

وعندما يكون $\left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle = 0$ (أى المؤثر f لا يحوى الزمن بصورة صريحة) تصبح المعادلة (6.43) من الشكل التالى :

$$\frac{d\langle f\rangle}{dt} = \langle \{H, f\}_{qu} \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, f] \rangle \quad (6.45)$$

ومنه ينتج أن تغير $\langle f \rangle$ بالنسبة للزمن يتحدد تمامًا بواسطة أقواس بواصون الكوانتية . وعند تبديل المؤثر f مع مؤثر هاملتون H فإن المقدار الفيزيائى $\langle f \rangle$ المقابل للمؤثر f سيكون مصونا . ويمكن البرهان على ذلك انطلاقا من (6.45) ، أى أن طاقة الجسيم المتحرك فى الحقل الكمونى $V(r)$ المستقل عن الزمن مصونة ، لأن العبارة

$$\{H, H\}_{qu} = \frac{i}{\hbar}(HH - HH)$$

تنعدم فى هذه الحالة ، ولهذا نجد طبقا لـ (6.45) ، أن :

$$\langle H \rangle = \text{const}$$

لكن طبقًا لمعادلة شريدينجر يكون $H\psi_n = E_n\psi_n$ ولهذا عندما $\psi = \psi(t) = \sum_n C_n\psi_n(t)$ نستطيع أن نحسب $\langle H \rangle$ بالشكل التالى :

$$\langle H\rangle = \int \psi^* H\psi\, d^3x = \sum_n |C_n|^2 E_n = E \qquad (6.46)$$

ويعنى ذلك أن العلاقة (6.46) تعبر عن قانون مصونية الطاقة (E = const) لجسيم يتحرك فى حقل قوى مستقل عن الزمن . ولنلاحظ أنه بمساواة H للصفر مع أى مؤثر تعنى وجود تناظر ما فى الجملة ، وللبرهان على ذلك ، نعتبر أن الطاقة الواقعة فى الحالة ψ طاقة تتعيّن بالعلاقة التالية :

$$E = \langle H\rangle = \int \psi^* H\psi\, d^3x$$

ولنعوض عن ψ و ψ^* بتابعين جديدين هما :

$$\psi' = F\psi\ , \qquad \psi^{*\prime} = \psi^* F^+$$

حيث F ـ مؤثر ما و F^+ ـ مؤثر هيرميت الاقترانى . ومنه نجد من أجل

الحالة الموصوفة للتابع ψ' أن :

$$E' = \int \psi^{*\prime} H\psi' d^3x \Big/ \int \psi^{*\prime}\psi' d^3x =$$
$$= \int \psi^* F^+ HF\psi\, d^3x \Big/ \int \psi^* F^+ F\psi\, d^3x$$

وستتطابق الطاقة E' مع E إذا تحقق ما يلى :

$$F^+F = I \quad , \quad F^+HF = H \qquad (6.47)$$

حيث I ـ مؤثر الوحدة . وبما أنه من المساواة الأولى ينتج أن المؤثر العكسى F^{-1} يساوى F^+ لذا يمكن كتابة المساواة الثانية بالشكل التالى :

$$HF = FH \qquad (6.48)$$

وعليه ، فإن تحويل التابع الموجى بواسطة المؤثـر ($F^+ = F^{-1}$) F التبديلى مع الهاملتونيان H ، لا يغير من طاقة الجملة ، وهذا ما يدل على وجود التناظر فيها . وإذا كان التحويل $F = F(\alpha)$ مستمرًا وتابعًا لبارامتر

حقيقى α ، بحيث يكون $F(0) = I$ تحويلا مطابقًا ، فإننا نجد عند القيم الصغيرة لـ α أن :

$$\psi' = F\psi \approx \psi + \alpha \frac{i}{\hbar} f\psi$$

حيث $(i / \hbar)f$ - مؤثر التحويل اللامتناهى فى الصغر . وفى هذه الحالة يؤدى الشرطان (6.47) و (6.48) بتقريب خطى إلى α إلى المساواتين التاليتين :

$$f = f^+ \quad , \quad Hf = fH$$

أى أن المؤثر f يجب أن يكون هرميتيا وتبديليا مع H . وكمثال على ذلك يمكن أن ندرس مؤثر الاندفاع $p_x = -(i\hbar)\partial / \partial x$ الذى يعطى الانتقال بامتداد المحور x أى أن :

$$\psi(x+\alpha) \approx \psi(x) + \alpha \frac{\partial \psi}{\partial x} = \psi(x) + \alpha \frac{i}{\hbar} p_x \psi$$

وبالطريقة نفسها وبدوران لامتناه فى الصغر حول المحور z نحصل عندما $\alpha \ll 1$ على أن :

$$\psi(\varphi+\alpha) \approx \psi(\varphi) + \alpha \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = \psi(\varphi) + \alpha \frac{i}{\hbar} L_z \psi$$

حيث $L_z = -(i\hbar)\partial/\partial\varphi$ مؤثر مسقط عزم الاندفاع L على المحور z .

وعليه فإن الخاصة التبديلية للمؤثرين p_x أو L_z مع الهاملتونيان H تعنى تناظر الجملة بالنسبة للانتقال بامتداد المحور x أو الدوران حول المحور z على الترتيب ، بحيث يبقى الاندفاع p_x أو عزمه L_z طبقًا لـ (6.45) مصونا .

د) **نظرية هرينفست** . لنبحث عن المعادلات الكوانتية المشابهة للمعادلات الكلاسيكية للحركة (6.34) ، ولهذا نستعمل أقواس بواصون الكوانتية . فإذا لاحظنا أن كلا من x و p_x لا يحوى الزمن بصورة صريحة نستطيع أن نستخدم (6.45) لحساب المشتقات مفترضين أن $f = x$ و $f = p_x$ على الترتيب ، أى أن :

و $f = p_x$ على الترتيب ، أى أن :

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \langle\{H, x\}_{qu}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle Hx - xH\rangle \qquad (6.49)$$

حيث

$$H = \frac{p_x^2}{2m_0} + V(x)$$

وإذا اعتبرنا x و $V(x)$ مقدارين تبديلين فيمكن تحويل (6.49) إلى الشكل التالى :

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{2m_0\hbar}\langle p_x^2 x - x p_x^2\rangle$$

وبإضافة العبارة $(p_x x p_x - p_x x p_x)$ التى تساوى الصفر إلى طرفى المعادلة السابقة نجد أن :

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i}{2m_0\hbar}\langle p_x(p_x x - x p_x) + (p_x x - x p_x)p_x\rangle \qquad (6.50)$$

وبالاستناد إلى (6.30a) نحصل على العلاقة التالية :

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{\langle p_x\rangle}{m_0} \qquad (6.51)$$

ولحساب تغير الاندفاع بالنسبة للزمن يجب أن نعوض عن المؤثر f فى (6.45) بمؤثر الاندفاع p_x ، وإذا لاحظنا أن $p_x p_x^2 - p_x^2 p_x = 0$ فإننا سنجد أن :

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = \langle\{H, p_x\}_{qu}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle V p_x - p_x V\rangle = -\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle \qquad (6.52)$$

ومنه طبقا لـ (6.51) ، نستخلص أن

$$m_0\frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle = -\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle = \langle F(x)\rangle \qquad (6.53)$$

ان المعادلتين (6.51) و (6.53) تعبران عن ما يسمى بنظرية هرينفست التى تبين أنه لتعميم المعادلات الأساسية فى الميكانيكا التقليدية على الحالة الكوانتية يجب أن نعوض عن المقادير الموجودة فى العلاقات التقليدية المقابلة بالقيم الوسطى للمؤثرات .

هـ) الانتقال من المعادلات الكوانتية للحركة إلى المعادلات الكلاسيكية . لنقارن المعادلة الكوانتية للحركة (6.53) مع نظيرتها التقليدية التالية :

$$m_o \ddot{x} = F(x) \qquad (6.54)$$

ونلاحظ أن المقدار $\langle x \rangle$ يلعب دور الاحداثى الكلاسيكى فى الميكانيكا الكوانتية ، ولهذا يمكننا أن نعتبر أن المعادلة الكوانتية تتطابق مع الكلاسيكية ، إذا وضعنا عوضًا عن (6.53) ، المعادلة التالية :

$$m_0 \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = F(\langle x \rangle) \qquad (6.55)$$

أى إذا بدلنا x فى العلاقة التقليدية التى تربط بين القوة والاحداثى بقيمته الوسطى $\langle x \rangle$ ، إلا أن معادلة الحركة الكوانتية تحوى متوسط القوة F أيضًا أى $\langle F(x) \rangle$. ولهذا كى ننقل المعادلة الكوانتية إلى المعادلة التقليدية ينبغى إيجاد العلاقة بين $\langle F(x) \rangle$ و $F(\langle x \rangle)$. ولذلك ، نكتب مؤثر القوة $F(x)$ بالشكل التالى :

$$F(x) = F(\langle x \rangle + \Delta x) \qquad (6.56)$$

حيث $\Delta x = x - \langle x \rangle$ ، وبنشر $F(x)$ بسلسلة تايلور فى جوار النقطة $x = \langle x \rangle$ نحصل على :

$$F(x) = F(\langle x \rangle) + (\Delta x) F'(\langle x \rangle) + \frac{(\Delta x)^2}{2} F''(\langle x \rangle) + \ldots \qquad (6.57)$$

وإذا أخذنـا متـوسط هـذه العلاقـة طبقًا لـ (6.3) ولاحظنـا أن $\langle \Delta x \rangle = \langle x - \langle x \rangle \rangle = 0$ نجد أن :

$$\langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle) + \frac{\langle (\Delta x)^2 \rangle}{2} F''(\langle x \rangle) + \ldots \qquad (6.58)$$

ولهذا تتحول المعادلة الكوانتية (6.53) إلى الشكل التالى :

$$m_0 \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = F(\langle x \rangle) + \frac{\langle (\Delta x)^2 \rangle}{2} F''(\langle x \rangle \qquad (6.59)$$

حيث يعتبر المقدار $\frac{\langle(\Delta x)^2\rangle}{2} F''(\langle x\rangle)$ تصحيحًا كوانتيًا داخلا على معادلة نيوتن . ومنه نستخلص أن معيار الانتقال من المعادلات الكوانتية إلى الكلاسيكية هوالمتراجحة التالية :

$$\langle(\Delta x)^2\rangle \ll 2\left|\frac{F(\langle x\rangle)}{F''(\langle x\rangle)}\right| \qquad (6.60)$$

بالرغم من أن تحقق هذا الشرط لا يعنى إمكانية تطبيق كل المفاهيم الكلاسيكية لوصف حركات الجسيمات الدقيقة فى الميكانيكا الكوانتية لأن متوسط الطاقة الحركية $\langle T \rangle$ فى الميكانيكا الكوانتية يتعين بالعلاقة التالية :

$$\langle T(p_x)\rangle = \frac{\langle p_x^2\rangle}{2m_0} = \frac{\langle p_x\rangle^2}{2m_0} + \frac{\langle(\Delta p_x)^2\rangle}{2m_0} \qquad (6.61)$$

حيث $\langle \Delta p_x \rangle = 0$, $\Delta p_x = p_x - \langle p_x \rangle$ فيما تمثل الطاقة الحركية الكلاسيكية بالمقدار :

$$T(\langle p_x\rangle) = \frac{\langle p_x\rangle^2}{2m_0} \qquad (6.62)$$

ومن هنا ينتج شرط الانتقال من العبارة الكوانتية للطاقة الحركية (6.61) إلى العبارة الكلاسيكية (6.62) ، أى أن :

$$\langle(\Delta p_x)^2\rangle \ll \langle p_x\rangle^2 = 2m_0 T(\langle p_x\rangle) \qquad (6.63)$$

وإذا ضربنا المتراجحة (6.63) بـ (6.60) نحصل على الشرط العام لامكانية تطبيق التقريب الكلاسيكى فى العالم المجهرى (عالم الجسيمات الدقيقة) ، أى أن :

$$\langle(\Delta x)^2\rangle \langle(\Delta p_x)^2\rangle \ll 4m_0 T(\langle p_x\rangle)\left|\frac{F(\langle x\rangle)}{F''(\langle x\rangle)}\right| \qquad (6.64)$$

وإذا أضفنا إلى ذلك علاقات الشك (6.30) نستطيع كتابة الشرط الأخير بالشكل النهائى التالى :

$$m_0 T(\langle p_x\rangle)\left|\frac{F(\langle x\rangle)}{F''(\langle x\rangle)}\right| \gg \frac{\hbar^2}{16} \qquad (6.65)$$

البند ٧ - الهزاز التوافقى الخطى

تعتبر مسألة الهزاز (النواس) التوافقى أحادى البعد من أهم مسائل الفيزياء النظرية ، لأنها تستخدم لبناء أبسط نظرية للاهتزاز تلك التى تملك أهمية كبرى فى مختلف فروع الفيزياء (فى الميكانيكا والالكتروديناميكا الكلاسيكية والالكترونيات والضوء والفيزياء الذرية وغيرها) . وقد أختبرت صحة النظريات الجديدة التى ظهرت مؤخرًا فى الفيزياء الذرية على مجموعة مسائل بسيطة من بينها بناء نظرية الهزاز التوافقى .

غالبًا ما يبدو جائزًا تحويل دراسة حركة جمل معقدة إلى دراسة مجموعة اهتزازات عادية مكافئة لذبذبات الهزازات التوافقية . ويعتبر بناء نظرية الهزاز التوافقى أمرًا مهما بالنسبة لنا أيضًا لأسباب منهجية ، إذ يمكّن حل هذه المسألة بصورة دقيقة من شرح تطبيق معادلة شرودينجر فى دراسة مسائل معينة بواسطة مثال بسيط . وتلعب مسألة الهزاز التوافقى دورًا هامًا عند إنشاء نظرية الحقل الكوانتية (التكميم الثانوى) وعند دراسة ما يسمى بالطاقة الصفرية للتحليل الكهرطيسى . وقد لاقت نظرية الهزاز التوافقى تطبيقًا ملموسًا لها فى نظرية الإشعاع المتوازن ، وكذلك عند بناء نظرية الأطياف ونظرية السعة الحرارية للجزيئات ثنائية الذرة .

أ) الهزاز التوافقى فى النظرية الكلاسيكية بتقريب *W.K.B.* . لندرس أولا النظرية الكلاسيكية للهزاز التوافقى الخطى* ، ولهذا نفترض أن نقطة مادية كتلتها m_0 تخضع لتأثير القوة المرنة التالية :

$$F = -kx \qquad (7.1)$$

* سندرس فى هذا البند حالة الحركة أحادية البعد فقط وسنكتب للاختصار بدلا من عبارة « الهزاز التوافقى الخطى » عبارة « الهزاز التوافقى » .

حيث k معامل المرونة ، وعليه نكتب المعادلة الكلاسيكية لحركة الهزاز التوافقى بالشكل التالى :

$$m_0\ddot{x} = -kx \qquad (7.2)$$

وهى التى تصف أبسط عملية اهتزازية . إن حل هذه المعادلة التفاضلية هو من النوع :

$$x = a\cos\omega t \qquad (7.3)$$

حيث $\omega = \frac{2\pi}{\tau} = \sqrt{\frac{k}{m_0}}$ التردد الدائرى و a - سعة الاهتزاز ، ونرى من (7.3) أن التسارع

$$w = \ddot{x} = -a\omega^2\cos\omega t \qquad (7.4)$$

لا يساوى الصفر ، وبالتالى يجب أن يرافق اهتزاز الجسيم المشحون إشعاع نحسب شدته (متوسط الطاقة المشعة فى الثانية الواحدة) طبقًا لقوانين الالكتروديناميكا الكلاسيكية وباعتبار (7.4) ، وبالعلاقة التالية :

$$W^{cl} = \frac{2e^2}{3c^3}\overline{\ddot{x}^2} = \frac{e^2a^2\omega^4}{3c^3} \qquad (7.5)$$

لقد أخذنا بعين الاعتبار عند استنتاج (7.5) أن متوسط $\cos^2\omega t$ هو :

$$\frac{1}{\tau}\int_0^{\tau}\cos^2\omega t\, dt = \frac{1}{2} \qquad (7.6)$$

ولنعبر الآن عن شدة الإشعاع W^{cl} بدلالة الطاقة الكلية $E = T + V$ للهزاز التوافقى وذلك باستخدام العبارتين المعروفتين للطاقة الكامنة

$$V(x) = -\int_0^{x} F(x)\, dx = \frac{m_0\omega^2x^2}{2} = \frac{m_0\omega^2a^2}{2}\cos^2\omega t \qquad (7.7)$$

والطاقة الحركية :

$$T = \frac{m_0\dot{x}^2}{2} = \frac{m_0\omega^2a^2}{2}\sin^2\omega t \qquad (7.8)$$

وعليه نجد أن :

$$E = V(x) + T = \frac{m_0\omega^2 a^2}{2} = \text{const} \qquad (7.9)$$

وبحذف a^2 من (7.5) وباستخدام (6.9) نجد أن :

$$W^{\text{cl}} = \frac{2e^2\omega^2 E}{3m_0 c^3} \qquad (7.10)$$

بعدئذ نعين شدة الإشعاع وتردده بواسطة النظرية الكلاسيكية ، وبالإضافة إلى ذلك نرى أن تردد هذا الإشعاع يتطابق مع التردد الميكانيكى للهزاز التوافقى ، أما طاقة الهزاز التوافقى فيمكن أن تأخذ أى قيمة مستمرة . غير أنه ، طبقًا للميكانيكا الكوانتية ، يجب أن تكون سويات الطاقة للهزاز التوافقى متقطعة . ويمكن حساب أبسط طيف للطاقة بطريقة .W.K.B بواسطة قاعدة بور - زومرفيلد للتكميم (5.39) :

$$\oint p_x\, dx = 2\pi\hbar\,(n + 1/2) \qquad (7.11)$$

حيث يساوى العدد الكوانتى $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$. أما الاندفاع p_x فيساوى

$$p_x = \sqrt{2m_0(E - V(x))} \qquad (7.12)$$

وبما أن $V(x) = m_0\, \omega^2 x^2 / 2$ لذا نحسب التكامل (7.11) كما يلى :

$$\oint p_x\, dx = 2\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m_0 E - m_0^2\omega^2 x^2}\, dx = \frac{2\pi E}{\omega_0}$$

حيث نحسب x_1 و x_2 من العلاقة :

$$V(x_1) = V(x_2) = E$$

وبتبديل هذا التكامل فى شرط التكميم (7.11) نجد أن طيف الطاقة للهزاز يكتب بالشكل التالى :

$$E_n = \hbar\omega\,(n + 1/2) \qquad (7.13)$$

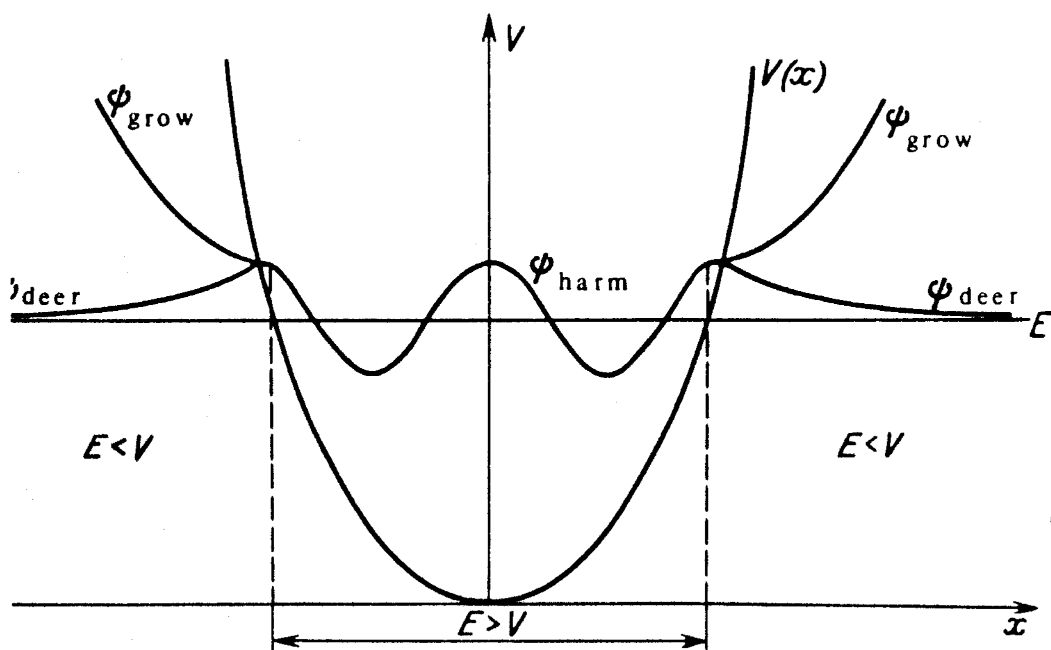
ونلاحظ أن النتيجة التى حصلنا عليها دقيقة تمامًا بالرغم من أننا استخدمنا

علاقة التقريب (7.11) لاستنتاجها . أما عند استعمال مبدأ تكميم بور فنحصل على نتيجة غير دقيقة تختلف عن (7.13) بالحد $1/2$.

ب) **التوابع الخاصة والقيم الخاصة للطاقة** . لتحديد طبيعة التابع الموجى Ψ فى مسألة الهزاز التوافقى نرسم قبل كل شىء ، الخط البيانى الذى يبين تبعية الطاقة الكامنة للمتغير x (انظر الشكل ٧ ـ ١) من

$$V = \frac{m_0 \omega^2 x^2}{2}$$

ويبدو من هذا الشكل أن الحل يجب أن يكون تابعًا طبيعته توافقية ضمن الحفرة الكمونية حيث تكون طاقة الهزاز التوافقى E أكبر من V ($E > V$) ، أما فى مجال الحفرة ($E < V$) فيتألف الحل من فرعين : متناقص ومتزايد ، انظر الشكل ٧ ـ ١ ، ومن الواضح أن حل المسألة سيؤول إلى



الشكل ٧ ـ ١ . التابع الموجى للهزاز التوافقى عند قيمة اختيارية للطاقة .

إيجاد الشروط التى من أجلها ينعدم الحل المتزايد ، وهذا غير ممكن ، كما رأينا عند دراسة الحفرة الكمونية المستطيلة ذات العمق اللانهائى (انظر البند ٤) عندما تأخذ الطاقة قيما متقطعة ، سنحسبها الآن . بما أن الطاقة الكامنة للهزاز التوافقى تتعلق بالاحداثيات فقط ، لذا يمكن كتابة معادلة شرودينجر بالشكل التالى :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - \frac{m_0\omega^2 x^2}{2}\right)\psi = 0 \qquad (7.14)$$

فإذا فرضنا أن :

$$\alpha = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}, \quad \beta = \frac{1}{x_0^2} = \frac{m_0\omega}{\hbar}, \quad \frac{\alpha}{\beta} = \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

ثم أدخلنا متغيرًا جديدًا :

$$\xi = x\sqrt{\beta} = \frac{x}{x_0} \qquad (7.15)$$

نحصل على المعادلة التالية :

$$\psi'' + (\lambda - \xi^2)\psi = 0 \qquad (7.16)$$

حيث

$$\psi'' = \frac{d^2\psi}{d\xi^2} \qquad (7.17)$$

ولنبحث أولا عن الطبيعة التقاربية للتابع الموجى عندما $\xi \to \pm\infty$ ، إذ يمكن إهمال المقدار الثابت λ بالمقارنة مع ξ^2 وعليه يكون لدينا :

$$\psi''_\infty - \xi^2\psi_\infty = 0 \qquad (7.18)$$

ونجد أن حل هذه المعادلة يكتب بالشكل التالى :

$$\psi_\infty = e^{\varepsilon\xi^2} \qquad (7.19)$$

وإذا اعتبرنا أن

$$\psi''_\infty = (4\varepsilon^2\xi^2 + 2\varepsilon)e^{\varepsilon\xi^2} \approx 4\varepsilon^2\xi^2 e^{\varepsilon\xi^2}$$

نجد أن :

$$\varepsilon = \pm 1/2 \qquad (7.20)$$

وبالتالى نستخلص أن :

$$\psi_\infty = C_1 e^{-1/2\,\xi^2} + C_2 e^{1/2\,\xi^2} \qquad (7.21)$$

وبما أن التابع الموجى يجب أن يكون محدودًا فى اللا نهاية لذا يمكن اعتبار المعامل C_2 مساويًا الصفر ، أما المعامل C_1 فيمكن اعتباره مساويًا الواحد لأن التابع الموجى لا يعد معايرًا ، وهكذا يمكننا أن نعبر عن الطبيعة التقاربية للتابع الموجى ψ كما يلى :

$$\psi_\infty = e^{-1/2\,\xi^2} \qquad (7.21a)$$

أما الحل العام من أجل التابع الموجى فسنبحث عنه بالشكل التالى* :

$$\psi = \psi_\infty u = e^{-1/2\,\xi^2} u \qquad (7.22)$$

إن هذا الحل يتلاءم مع طبيعة التابع فى اللانهاية ، فإذا بدلنا العبارة الأخيرة فى (7.16) واعتبرنا أن :

$$(e^{-1/2\,\xi^2}u)'' = [u'' - 2\xi u' + (\xi^2 - 1)\,u]\,e^{-1/2\,\xi^2}$$

فإننا نجد لتعيين u المعادلة التفاضلية التالية :

$$u'' - 2\xi u' + (\lambda - 1)\,u = 0 \qquad (7.23)$$

التى سنبحث عن حلها بشكل سلسلة :

$$u = \sum_{\kappa=0} b_\kappa \xi^\kappa \qquad (7.24)$$

وإذا بدلنا عبارة u الأخيرة فى المعادلة (7.23) نجد أن :

$$\sum_{\kappa=0} b_\kappa \left[\kappa\,(\kappa - 1)\,\xi^{\kappa-2} - (2\kappa + 1 - \lambda)\,\xi^\kappa\right] = 0$$

---

* نلاحظ أن التحويل (7.22) عند أية قيمة اختيارية للتابع $u\,(x)$ لا يمكن أن يستثنى أى حلول ولكى لا تعود المركبة الأسية المتزايدة للظهور مرة أخرى يكفى أن نضع شروطا أخرى على التابع $u\,(x)$ ، أى أن الحل $u\,(x)$ على شكل كثير حدود من الدرجة n .

ولنغير وسيط الجمع بحيث نجمع الحدود التى لها الأس نفسه فنجد أن :

$$\sum_{\kappa=0} \xi^{\kappa} [b_{\kappa+2} (\kappa + 2) (\kappa + 1) - b_{\kappa} (2\kappa + 1 - \lambda)] = 0$$

ومنه هنا نحصل ، بإعدام أمثال الحدود ξ^{κ} ، على العلاقة التكرارية للعوامل b_k أى أن :

$$b_{\kappa+2} = b_{\kappa} \frac{(2\kappa + 1 - \lambda)}{(\kappa + 2) (\kappa + 1)} \qquad (7.25)$$

إذ تربط هذه العلاقة العوامل b_k مع b_{k+2}.وبالطريقة نفسها يمكن حساب العلاقة التى تربط ما بين العوامل b_{k+1} و b_{k+3} وهلمجرى . وبهذا نحصل على حلين مستقلين لتعيين السلسلة (7.24) حيث يربط الحل المستقل الأول العوامل ذات الأس الزوجى لـ ξ ، بينما يربط الحل الآخر ، على العكس من ذلك ، العوامل ذات الأس الفردى . ونرى من العلاقة (7.25) أنه يمكن قطع أحد الحلين (أى جعله كثير حدود) عند حد ما n (حيث n ـ عدد صحيح موجب قد يكون الصفر أيضًا) . ولهذا يجب أن نفترض أن :

$$\lambda = 2n + 1 \qquad (7.26)$$

وباعتبار أن $0 \neq b_n$ وأن

$$b_{n+2} = b_{n+4} = b_{n+6} = \dots = 0 \qquad (7.27)$$

ومن (7.26) و (7.14) تكتب علاقة الطيف المتقطع لقيم الطاقة الممكنة بالشكل التالى :

$$E_n = \hbar\omega (n + 1/2) \qquad (7.28)$$

حيث ... , 3 , 2 , 1 , 0 = n .

ونرى ، خلافًا لنظرية بور ، أن طاقة الصفر ($n = 0$) لا تنعدم وإنما تساوى :

$$E_0 = 1/2\hbar\omega \qquad (7.28a)$$

ولذلك فإن ظهور طاقة الصفر مرتبط مع علاقة اللا تعيين (الشك) أى مع الخواص الموجية للجسيمات ، وهى تؤثر على تردد الإشعاع . ولا نستطيع طبقًا للشرط (7.26) قطع السلسلة الثانية ذات العوامل b_{n+1} و b_{n+3} التى تشكل الحل الثانى المستقل ؛ لأن نسبة كل عاملين متتاليين فى هذه السلسلة ، طبقًا لـ (7.25) عندما $s \to \infty$ تنتهى إلى الحد التالى :

$$\frac{b_{n+3+2s}}{b_{n+1+2s}} = \frac{1}{s} \qquad (7.29)$$

وهى كالتابع e^{ξ^2} المنشور فى السلسلة ، أى أن

$$e^{\xi^2} = \sum_{s=0,1,\dots} \frac{1}{s!} \xi^{2s} \qquad (7.29a)$$

ولهذا نرى أن $u \to e^{\xi^2}$ عندما $\xi \to \pm\infty$ أى أننا نحصل من جديد على حل متباعد $\psi_\infty \to e^{1/2\,\xi^2}$ يحبذ إهماله* . ويجب أن يمثل الحل الأول ، أنظر (7.24) ، كثير حدود من الحدود n . وإذا فرضنا أن معامل درجة أعلى عند $k_{max} = n$ يساوى** .

$$b_n = 2^n \qquad (7.30)$$

نجد أن بقية المعاملات ستكون كما يلى :

$$b_{n-2} = -2^{n-2} \frac{n(n-1)}{1!}$$

$$b_{n-4} = 2^{n-4} \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} \dots \qquad (7.31)$$

وإذا اقتصرنا دراستنا على الحدود الأولى n من السلسلة الأسية للتابع u فإننا بذلك نحصل على ما يسمى بكثير حدود هرميت الذى يكتب بالشكل التالى :

---

* إذا لم نضع على الوسيط λ الشرط (7.26) فإن كلا الحلين سيكونان متباعدين $\xi \to \pm\infty$.

** نلاحظ أن هذا المعامل يبقى اختياريا لأننا لم نعين بعد ثابت معايرة التابع الموجى .

$$u = H_n(\xi) = (2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!}(2\xi)^{n-2} +$$

$$+ \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}(2\xi)^{n-4} + \ldots + \begin{cases} b_1\xi & \text{عندما يكون } n \text{ عددًا فرديا} \\ b_0 & \text{عندما يكون } n \text{ عددًا زوجيا} \end{cases}$$

(7.32)

ومنه نجد أن :

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \qquad (7.33)$$

كما يمكن كتابة كثير حدود هرميت بشكله المغلق :

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \qquad (7.34)$$

ملاحظة : لبرهان ذلك ندخل التابع $v = e^{-\xi^2}$ الذى يحقق المعادلة

$$v' + 2\xi v = 0$$

فإذا اشتققنا المعادلة الأخيرة $(n+1)$ مرة باستخدام صيغة ليبنيز نحصل على :

$$(yz)^{(n)} = y^{(n)}z + ny^{(n-1)}z' + \frac{n(n-1)}{2!}y^{(n-2)}z'' + \ldots \qquad (7.34a)$$

وعليه نجد أن

$$v^{(n+2)} + 2\xi v^{(n+1)} + 2(n+1)v^{(n)} = 0$$

فإذا فرضنا أن

$$v^{(n)} = e^{-\xi^2} w$$

نرى أن التابع w يحقق المعادلة (7.35) أى يتناسب طردًا مع كثير حدود هرميت :

$$w = e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} = A_n H_n$$

حيث يمكن حساب A_n من تساوى أمثال ξ^n فى الطرفين ونتيجة ذلك نرى أن $A_n = (-1)^n$ وعليه نحصل على العلاقة (7.34) .

ونرى من (7.32) أن $H_n(\xi)$ يحقق المعادلة (7.23) وذلك عندما يكون فى الأخيرة $\lambda = 2n + 1$ ، أى أن :

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0 \qquad (7.35)$$

أما أن حل معادلة شرودينجر للهزاز التوافقى ، طبقًا لـ (7.22) و (7.32) ، يكتب بالشكل التالى :

$$\psi_n = C_n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi) \qquad (7.36)$$

بالإضافة إلى أن المتغير ξ مرتبط بالاحداثى x بالعلاقة (7.15) . كما يمكن حساب C_n من شرط المعايرة ، ولهذا ندرس التكامل التالى :

$$I_{nn'} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \psi_{n'}\, dx = x_0 C_n C_{n'} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi)\, H_{n'}(\xi)\, d\xi \qquad (7.37)$$

علمًا أن $n \geqslant n'$ ، وإذا أدخلنا هنا كثير الحدود $H_n(\xi)$ بالشكل (7.34) نحصل بعد n مرة من المكاملة بالتجزئة على ما يلى :

$$I_{nn'} = (-1)^n x_0 C_n C_{n'} \int_{-\infty}^{\infty} H_{n'} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}\, d\xi = x_0 C_n C_{n'} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n H_{n'}}{d\xi^n}\, d\xi$$

(7.38)

وإذا كانت $n > n'$ فإن تفاضل التابع (كثير حدود هرميت (H_n)) ، n مرة يؤول إلى الصفر أى $I_{nn'} = 0$ وهكذا نكون قد برهنا تعامد التابعين ψ_n ، $\psi_{n'}$ عندما $n \neq n'$ أما عندما $n = n'$ فنجد ، طبقًا لـ (7.32) ، أن :

$$\frac{d^n}{d\xi^n} H_n(\xi) = 2^n n!, \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} \qquad (7.39)$$

ثم وعندما تكون التوابع ψ_n معايرة على الواحد ($I_{nn} = 1$) نجد أن :

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}\; x_0}} \qquad (7.40)$$

وعليه فإن التوابع الموجية

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}\; x_0}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \qquad (7.41)$$

ستكون متعامدة ومعايرة ، أى أن :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n'}^* \psi_n\, dx = \delta_{n'n}$$

ملاحظة : يلاحظ من (7.32) أن العدد الكوانتى n يميز زوجية التابع الموجى بالإضافة إلى أنه يميز الطاقة ، فعندما يكون n زوجيًا فإن كثير حدود هرميت H_n ومعه التابع الموجى ψ_n ، يكونان زوجيين ، أى لا تتغير إشارتهما عند تبديل x بـ $(-x)$ أى أن

$$\psi_n(-x) = \psi_n(x) \qquad (7.42)$$

أما عندما يكون n فرديًا فإن التابع $\psi_n(x)$ يكون فرديًا أيضًا:

$$\psi_n(-x) = -\psi_n(x) \qquad (7.43)$$

ونلاحظ أنه إذا لم تحقق λ ، فى المعادلة (7.16) الشرط (7.26) فلا يمكن التعبير عن الحل بكثير حدود هرميت وعندئذ نفترض $z = \sqrt{2}\,\xi$ و $\lambda = 2\nu + 1$ فنحصل على حل المعادلة (7.16) المستقل خطيًا بالشكل التالى :

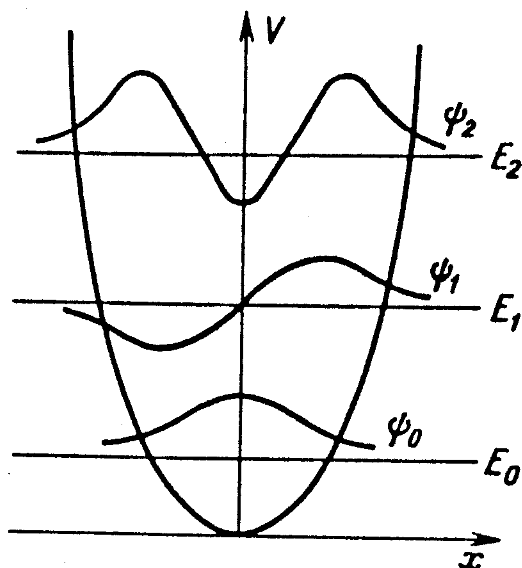
$$\psi = C_1 D_\nu(z) + C_2 D_\nu(-z)$$

والذى يكتب بواسطة التوابع الأسطوانية المكافئة (توابع ويبير - هرميت) $D_\nu(z)$ و $D_\nu(-z)$. بحيث $\nu = n = 0, 1, 2, \ldots$ والتوابع $D_\nu(\pm z)$ تكتب بواسط كثير حدود هرميت $H_n(z/\sqrt{2})$ نحصل من جديد على الحل (7.41) .

أما فى مجال الأعداد الكوانتية الصغيرة ، مثلا عندما $n = 0,1,2,$ ، فنجد أن

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{1}{2}\hbar\omega, & \psi_0 &= C_0 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ E_1 &= \frac{3}{2}\hbar\omega, & \psi_1 &= C_1 \cdot 2\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ E_2 &= \frac{5}{2}\hbar\omega, & \psi_2 &= C_2 \cdot (4\xi^2 - 2)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \end{aligned} \qquad (7.44)$$

وقد مثلنا بيانًا على الشكل ٧ - ٢ كل من القيم الخاصة والتوابع الخاصة للهزاز ، ونرى أن هذا الشكل يشبه المنحنيات التى حصلنا عليها من أجل الحفرة الكمونية (انظر الشكل ٤ - ٣) ويقابل التابع ψ_0 القيمة الأساسية ، أما ψ_1 فيقابل الأولى (التوافقى الأول) وأما ψ_2 فيقابل الثانية وهكذا دواليك .



الشكل ٧ ـ ٢ . الخط البيانى للقيم الخاصة والتوابع الخاصة للهزاز (عندما $n = 0,1,2.$) .

جـ) الحالات المنسجمة . لقد رأينا سابقًا أن أصغر طاقة للهزاز التوافقى تختلف عن الصفر ، بينما تساوى الصفر طبقًا للنظرية الكلاسيكية ونظرية بور . ولذلك علينا أن نبرهن الآن أن السوية الأساسية لطاقة الهزاز $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ ترتبط بعلاقة اللاتعيين ، أى أن :

$$\langle(\Delta x)^2\rangle \langle(\Delta p)^2\rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4} \quad (7.45)$$

ويمكن أثناء دراستنا للهزاز التوافقى فى الحالة المستقرة تبديل $\langle(\Delta x)^2\rangle$ بـ $\langle x^2\rangle$ و $\langle(\Delta p)^2\rangle$ بـ $\langle p^2\rangle$ لأن التوابع الموجية ψ_n حقيقية وتكون إما زوجية وإما فردية ، وبسبب فردية التابعين $-i\hbar\psi_n^* d\psi_n/dx$ ، $\psi_n^* x\psi_n$ نجد أن

$$\langle x\rangle = \int \psi_n^* x\psi_n\, dx = 0, \quad \langle p\rangle = \int \psi_n^* \left(\frac{\hbar}{i}\, \frac{d\psi_n}{dx}\right) dx = 0$$

ومنه يكون لدينا :

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \langle x^2\rangle$$
$$\langle(\Delta p)^2\rangle = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2 = \langle p^2\rangle$$

وإذا عوضنا قيمة $\langle p^2 \rangle$ من (7.45) فى عبارة الطاقة الكلية

$$E = \langle H\rangle = \frac{\langle p^2\rangle}{2m_0} + \frac{m_0\omega^2\langle x^2\rangle}{2}$$

سنحصل بذلك على أن :

$$E \geqslant \frac{h^2}{8m_0\langle x^2\rangle} + \frac{m_0\omega^2\langle x^2\rangle}{2}$$

وإذا اعتبرنا أن مشتقة E بالنسبة $\langle x^2 \rangle$ تساوى الصفر نجد أن أصغر قيمة لـ E تساوى :

$$E \geqslant E_{min} = \frac{h\omega}{2} \quad \text{و} \quad \langle x^2\rangle = \frac{1}{2}x_0^2$$

وعليه فإن قيمة الطاقة E_{min} تتطابق مع القيمة E_0 التى حصلنا عليها بالنظرية الموجية ، أنظر (7.28a) ، ومنه نستخلص أن تواجد الطاقة الصفرية المحدودة للهزاز التوافقى هو أحد مظاهر الخواص الموجية للجسيمات ، وبهذا الصدد فقد كانت للتأكيدات التجريبية بوجود الاهتزازات الصفرية أهمية كبرى فى الميكانيكا الكوانتية . وقد اكتشفت الطاقة الصفرية E_0 لأول مرة فى تجارب رونتجن أثناء دراسته لتبدد الأشعة على البلورات فى درجات الحرارة المنخفضة . فعند غياب الاهتزاز فى البلورة فى هذه الدرجات ($E_0 = 0$) ، كما ينتج مثلا من نظرية بور ، لن يكون هناك أى تأثير متبادل وبالتالى أى تبدد للأشعة على الشبكة البلورية ، وبالعكس إذا اختلفت أصغر طاقة عن الصفر $E_0 \neq 0$ فيجب أن يتواجد مقطع عرضى فعّال تنتهى قيمة الطاقة فيه أثناء التبدد فى درجات الحرارة المنخفضة ، إلى قيمة حدية لا تساوى الصفر . ولقد برهنت التجارب صحة هذه الفرضية ، أى أنها أكدت صحة نتائج نظرية شرودينجر الموجية . والهام فى الأمر أنه

فى الحالة الرئيسية للهزاز ذى الطاقة الصغرى $E_0 = \hbar\omega/2$ نجد أنه إذا كان $\langle x^2\rangle = \frac{x_0^2}{2}$ فإنه سيكون لدينا : $\langle p^2\rangle = 2m_0 E_0 - m_0^2\omega^2 \langle x^2\rangle = \frac{m_0\hbar\omega}{2}$ ، أى أن جداء اللاتعيين (7.45) يأخذ قيمته الصغرى ، أى أن :

$$\langle(\Delta x)^2\rangle \langle(\Delta p)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \qquad (7.46)$$

أما التوزع بالنسبة للاحداثيات فى هذه الحالة $n = 0$ فيكون كما يتبين من (7.44) على شكل توزّع غاووس ، أى أن :

$$|\psi_0|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}\ x_0} e^{-\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}$$

ولننشىء الآن تابعًا موجيًا أعم يصف حالة الجسيم ، بحيث يأخذ جداء اللا تعيين من أجل x و p قيمته الصغرى (7.46) . ولذلك نأخذ عوضًا عن التابع ψ_0 التابع ψ_α الذى حصلنا عليه من ψ_0 باستبدال المتغير x إلى $x - x_0\alpha\sqrt{2}$ ، حيث α عدد عقدى اختيارى ، وبالنتيجة نحصل على التابع المعاير على الواحد بالشكل التالى :

$$\psi_\alpha = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\ x_0}} e^{1/2(\alpha^2 - \alpha\alpha^*)} e^{-1/2\left(\frac{x}{x_0} - \sqrt{2}\ \alpha\right)^2} \qquad (7.47)$$

وعندئذ يأخذ التوزع بالنسبة للاحداثيات شكل توزع غا وس أيضًا ، أى أن :

$$|\psi_\alpha|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}\ x_0} e^{-\left(\frac{x}{x_0} - \sqrt{2}\ \mathrm{Re}\,\alpha\right)^2}$$

حيث $\mathrm{Re}\,\alpha$ القسم الحقيقى من $\alpha = \mathrm{Re}\,\alpha + i\,\mathrm{Im}\,\alpha$ وينتج من المساواة الأخيرة أن الحالة (7.47) تقودنا إلى القيمة الوسطى :

$$\langle x\rangle = x_0\sqrt{2}\ \mathrm{Re}\,\alpha$$

التى تختلف عن الصفر فى الحالة العامة . أما من أجل القيمة الوسطى لـ p فى الحالة (7.47) فنحصل على :

$$\langle p\rangle = \int \psi_\alpha^* \frac{i\hbar}{x_0}\left(\frac{x}{x_0} - \sqrt{2}\ \alpha\right)\psi_\alpha\, dx = \sqrt{2}\ \frac{\hbar}{x_0}\mathrm{Im}\,\alpha$$

ومن السهل التأكد من أن تشتت الاحداثى x فى الحالة Ψ_α يساوى إلى :

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \frac{1}{2} x_0^2$$

أى أنه يتطابق مع نفس قيمته فى الحالة ψ_0 أما متوسط p^2 فنحسبه بالشكل التالى :

$$\langle p^2\rangle = \int \psi_\alpha^* \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \psi_\alpha \, dx =$$
$$= \int \psi_\alpha^* \frac{2\hbar^2}{x_0^2} \left| \frac{x}{x_0\sqrt{2}} - \mathrm{Re}\,\alpha - i\,\mathrm{Im}\,\alpha \right|^2 \psi_\alpha \, dx = \frac{\hbar^2}{x_0^4} \langle(\Delta x)^2\rangle + \langle p\rangle^2$$

ومن هنا نجد أن تشتت الاندفاع يساوى :

$$\langle(\Delta p)^2\rangle = \frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{x_0^2},$$

أما جداء اللاتعيين فيساوى قيمته الوسطى (7.46) . ومنه نجد أن الحالة التى حصلنا عليها ψ_α (7.47) يمكن أن تصاغ بشكل نشر من طاقم للتوابع الموجية للهزاز (7.41) أى أن :

$$\psi_\alpha(x) = \sum_n C_n \psi_n(x)$$

ولحساب عوامل النشر C_n يجب تكرار نفس ما فعلناه عند حساب تكامل المعايرة (7.37) أى استعمال الشكل المغلق (7.34) لكثير حدود هرميت H_n ، أى أن :

$$C_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_\alpha \, dx = \frac{(-1)^n x_0}{\sqrt{\sqrt{\pi}\, x_0 n! 2^n}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\alpha e^{1/2\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} d\xi$$

حيث $\xi = \frac{x}{x_0}$ ، وإذا بدلنا هنا قيمة ψ_α (7.47) واستكملنا n مرة بالتجزئة نجد أن :

$$C_n = \alpha^n (n!)^{-1/2} e^{-|\alpha|^2/2}$$

وعليه يكون لدينا :

$$\psi_\alpha(x) = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{(n!)^{1/2}} \psi_n(x)$$

ومن هنا ينتج أن للتوزع بالاعداد الكوانتية n فى الحالة (7.48) شكل توزع بواصون نفسه

$$|C_n|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2}$$

ذى القيمة الوسطى $\langle n \rangle = |\alpha|^2$. أما إذا انتقلنا من (7.48) إلى التوابع الموجية المتعلقة بالزمن $\psi_n(x, t) = e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(x)$ ، نحصل على الحل التالى :

$$\psi_\alpha(x, t) = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{-i\omega t/2} \sum_n \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{(n!)^{1/2}} \psi_n(x) \qquad (7.48a)$$

الذى يحقق معادلة شرودينجر المتعلقة بالزمن للهزاز التوافقى ، ويبدو أن اختلاف $\psi_\alpha(x, t)$ عن $\psi_\alpha(x)$ ، إذا أهملنا المضروب الطورى العام $e^{-i\omega t/2}$ ، يتمثل فى تبديل α بـ $\alpha e^{-i\omega t}$ ، ولهذا تتغير القيمة الوسطى لكل من x و p بالنسبة للزمن فى الحالة (7.48a) ، بالشكل التالى :

$$\langle x \rangle = \sqrt{2}\, x_0 \,\mathrm{Re}\,(\alpha e^{i\omega t}), \quad \langle p \rangle = \sqrt{2}\, \frac{\hbar}{x_0}\, \mathrm{Im}\,(\alpha e^{i\omega t})$$

أى طبقًا لقوانين الميكانيكا الكلاسيكية . ان تراكب الحلول المستقرة ، من الشكل (7.48a) للهزاز ، يصف ما يسمى بالحالات المنسجمة ويمثل رزما موجية ضيقة لها القيمة الأصغر فى علاقة الشك . وقد استخرجها شرودينجر للمرة الأولى عام ١٩٢٦ من أجل حالات أقرب للحالات الكلاسيكية وتستخدم الآن بشكل واسع لدراسة الخواص المنسجمة للاشعاع الكهرطيسى فى النظرية الكوانتية للحقل (غلاوبير ـ ١٩٦٣) .

د) مبادىء (عناصر) التمثيل (التصورات) فى الميكانيكا الكوانتية . يتعلق التابع الموجى فى نظرية شرودينجر التى درسناها سابقًا بالاحداثيات الفراغية ، وطبقًا للطبيعة الإحصائية للتابع الموجى ، يرتبط مربع القيمة المطلقة للتابع باحتمال تواجد الجسيم فى نقطة من الفراغ احداثياتها $r, r+dr$ ويقال فى هذه الحالة أن التابع الموجى (وكافة المؤثرات الأخرى) يعطى بالتمثيل الاحداثى أو بدلالة الاحداثيات ، ويكون

هذا التمثيل ملائمًا من أجل حل عدد من المسائل . هذا ويوجد فى الميكانيكا الكوانتية التمثيل الاندفاعى والتمثيل المصفوفى (الطاقوى) وتمثيلات أخرى غيرها . ولتوضيح المسألة بشكل مفصل نأخذ كمثال الهزاز التوافقى . فنكتب تابع هاملتون لهذا الهزاز مع الحفاظ على الارتباط بالاندفاع والاحداثى ، الموجود فى النظرية الكلاسيكية أى أن :

$$H=\frac{p^2}{2m_0}+\frac{m_0\omega^2x^2}{2} \tag{7.49}$$

ولكننا الآن نفرض أن x و p ليست مقادير عادية متبادل فيما بينها (ليست ما يسمى بالاعداد-c) وإنما هى مؤثرات (الاعداد - q) تحقق القانون التبادلى التالى :

$$px-xp=\frac{h}{i} \tag{7.50}$$

ويمكن أن تتحقق العلاقة الأخيرة بعدة طرائق تقابل كل منها نوعا من التمثيل فى الميكانيكا الكوانتية وتختلف هذه الطرائق فيما بينهما باختلاف تبعية التابع الموجى للاحداثيات أو للاندفاعات ، ولندرس التمثيلات الأساسية المختلفة التى يمكن أن تنشأ فى الميكانيك الكوانتية ونقيم العلاقة بينها .

١ ـ التمثيل الاحداثى (التمثيل ـ x)

إذا فرضنا أن الاندفاع هو مؤثر (العدد q) فإننا نحصل على :

$$p = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \tag{7.51}$$

واعتبرنا فى نفس الوقت الاحداثى x عددًا عاديًا c ، عندئذ يكون المقدار $\hbar/i$ ، بمثابة قيمة خاصة للمؤثر (7.50) عند تأثيره على تابع موجى $\psi(x)$ متعلق بالاحداثى x .

$$(px - xp)\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\psi(x) \tag{7.52}$$

وإذا بدلنا (7.51) فى المعادلة (7.49) نجد أن الهاملتونيان يصبح مؤثرًا أيضًا

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m_0\omega^2}{2}x^2 \tag{7.53}$$

بينما تؤول مسألة حساب القيم الخاصة إلى معادلة شرودينجر (التمثيل x) للهزاز التوافقى ، أى أن :

$$\left(E - Ax^2 + B\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi(x) = 0 \tag{7.54}$$

حيث

$$A = \frac{m_0\omega^2}{2}, \quad B = \frac{\hbar^2}{2m_0} \tag{7.55}$$

وبإدخال المقدار

$$\lambda = \frac{E}{\sqrt{AB}} = \frac{2E}{\hbar\omega} \tag{7.56}$$

وبافتراض أن

$$x_0 = \sqrt[4]{\frac{B}{A}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0\omega}} \tag{7.57}$$

نجد أن القيم الخاصة ، أنظر (7.26) و (7.28) ، للثابت تساوى :

$$\lambda_n = 2n + 1 \tag{7.58}$$

ومنه نحصل على :

$$E_n = \hbar\omega\,(n + {}^1\!/_2) \qquad (7.59)$$

حيث ... $n = 0, 1, 2, 3,$. أما التوابع الموجية فتعين بالمساواة (7.41) أى أن :

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\,\sqrt{\pi}\;x_0}}\,e^{-{}^1\!/_2\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \qquad (7.60)$$

وتخضع لشرط المعايرة التالى :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\,\psi_n(x)\,|^2\,dx = 1 \qquad (7.61)$$

وطبقًا للمبادىء الأساسية للنظرية ، تكون المقادير الملاحظة فى التجربة متوسطات للمؤثرات المقابلة لهذه المقادير ، أما التابع الموجى فيلعب دورًا مساعدًا فقط ، وفى نظرية الهزاز التوافقى تلعب العناصر المصفوفية للاحداثى وللاندفاع دورًا هامًا أيضًا أى أن :

$$x_{n'n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*_{n'}\,x\,\psi_n\,dx \qquad (7.62)$$

و

$$p_{n'n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*_{n'}\,\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial x}\,\psi_n\,dx \qquad (7.63)$$

هما اللذان يصفان عملية الإشعاع ، سنشرح ذلك فيما بعد . ولحساب التكاملين السابقين سنستخدم علاقتين تحققهما التوابع الموجية للهزاز التوافقى ، أى أن :

$$x\psi_n = x_0\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\,\psi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\psi_{n+1}\right) \qquad (7.64)$$

$$\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial\psi_n}{\partial x} = -\,i m_0\omega x_0\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\,\psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\psi_{n+1}\right) \qquad (7.65)$$

وللتحقق من صحة هاتين العلاقتين نحسب مشتقة كثير حدود هرميت ، أى أن :

$$H'_n = 2n\left[(2\xi)^{n-1} - \frac{(n-1)(n-2)}{1!}(2\xi)^{n-3} + \dots\right] = 2nH_{n-1} \quad (7.66)$$

ومن السهل البرهان بنفس الطريقة أن $H_n'' = 2n2(n-1)H_{n-2}$. فإذا بدلنا قيم هاتين المشتقتين فى (7.35) وأجرينا التغيير $n \to n+1$ نجد العلاقة التكرارية بين كثيرات حدود هرميت ، أى أن :

$$\xi H_n = nH_{n-1} + \frac{1}{2}H_{n+1} \quad (7.67)$$

ومن السهل التأكد من صحة العلاقتين (7.67) ، (7.66) باستخدام العلاقتين (7.65) ، (7.64) ويأخذ (7.41) بعين الاعتبار فإذا عوضنا (7.64) و (7.65) على الترتيب فى المساواتين (7.62) و (7.63) واعتبرنا شرط التعامد والمعايرة نجد قيم العناصر المصفوفية للاحداثيات التى تختلف عن الصفر أى أن :

$$x_{n-1,n} = x_0\sqrt{\frac{n}{2}}, \quad x_{n+1,n} = x_0\sqrt{\frac{n+1}{2}} \quad (7.68)$$

أما العناصر المصفوفية للاندفاعات التى تختلف عن الصفر فتكتب بالشكل التالى :

$$p_{n-1,n} = -im_0\omega x_{n-1,n}, \quad p_{n+1,n} = im_0\omega x_{n+1,n} \quad (7.69)$$

٢ ـ التمثيل الاندفاعى (التمثيل ـ p)

نحصل على هذا التمثيل إذا اعتبرنا فى علاقة المؤثرات (7.50) الاندفاع p عددًا عاديًا مثلا العدد ـ c والاحداثى مؤثرًا (العدد q) ، أى أن :

$$x = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p} \quad (7.69a)$$

ويمكن التأكد بسهولة من أنه عند تأثير هذا المؤثر على التابع الموجى المتعلق الآن بالاندفاع p* يجب أن تتحقق العلاقة التالية :

$$(px - xp)\,\varphi(p) = \frac{\hbar}{i}\,\varphi(p) \qquad (7.70)$$

ولنقوم الآن ببناء نظرية الهزاز التوافقى فى التمثيل الاندفاعى . لذا نبدّل قيمة المؤثر (7.69a) فى المعادلة (7.49) فنجد أن :

$$\left(E - A_1 p^2 + B_1 \frac{d^2}{dp^2}\right)\varphi(p) = 0 \qquad (7.71)$$

حيث

$$A_1 = \frac{1}{2m_0}, \quad B_1 = \frac{m_0\omega^2\hbar^2}{2} \qquad (7.72)$$

ومن هنا نرى أنه من أجل الهزاز التوافقى ، عند الانتقال من التمثيل - x إلى التمثيل - p ، تتحول المعادلة الموجية بعد إدخال مقاييس جديدة إلى الشكل التالى :

$$\lambda_1 = \frac{E}{\sqrt{A_1 B_1}} = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

$$p_0 = \sqrt[4]{\frac{B_1}{A_1}} = \sqrt{m_0\omega\hbar} = \frac{\hbar}{x_0}, \quad \eta = \frac{p}{p_0} \qquad (7.73)$$

الذى يطابق شكلها الأولى تمامًا ، أى

$$\varphi'' + (\lambda_1 - \eta^2)\,\varphi = 0 \qquad (7.74)$$

حيث يتم الاشتقاق بالنسبة لـ η . وباستخدام الحلين (7.28) و (7.41) نكتب فى التمثيل - p** ما يلى :

$$E_n = \frac{\lambda_1\hbar\omega}{2} = \hbar\omega\,(n + 1/2) \qquad (7.75)$$

---

* لنلاحظ أن مربع التابع الموجى فى فراغ الاندفاعات يعتبر كثافة لاحمال وجود جسيم اندفاعه محصور بين p و $p + dp$.

** سنبيّن أهمية إدخال المضروب $(-i)^n$ ، الذى مربع قيمته المطلقة يساوى الواحد فيما بعد ، انظر (7.82) مثلا .

ونكتب التابع الموجى كما يلى :

$$\varphi_n(p) = \frac{(-i)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}\, p_0}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{p}{p_0}\right)^2} H_n\left(\frac{p}{p_0}\right) \qquad (7.76)$$

حيث أن التابع الموجى $\varphi_n(p)$ يجب أن يحقق شرط التعامد والمعايرة :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp \varphi^*_{n'}(p)\, \varphi_n(p) = \delta_{n'n} \qquad (7.77)$$

ويمكن التأكد فى هذه الحالة من أن $\varphi(p)$ سيكون نموذج فورييه للتابع $\Psi(x)$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \varphi(p)\, e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp \qquad (7.78)$$

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x)\, e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx \qquad (7.79)$$

ولما كانت

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx' \psi(x') \int dp e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')} \qquad (7.80)$$

لأن

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')} = \delta(x-x')$$

وعليه نحصل على العلاقة (7.76) بواسطة تحويلات فورييه (7.79) .

وبتعويض قيمة $\psi_n(x)$ من (7.41) نجد أن :

$$\varphi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}\, x_0}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} e^{-i\frac{p}{\hbar}x} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{x_0}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}\, \hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} e^{-i\frac{p x_0}{\hbar}\xi} H_n(\xi) \qquad (7.81)$$

من المعلوم أن نموذج فورييه للتابع (7.60) يتحول إلى نفسه ، لكن بمضروب آخر $\sqrt{2\pi}\,(-i)^n$ أى أن :

$$\varphi_n(p) = \frac{(-i)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}\, p_0}} H_n\left(\frac{p}{p_0}\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{p}{p_0}\right)^2} \qquad (7.82)$$

وهذا ما يبرر إدخال المضروب $(-i)^n$ فى التابع الموجى (7.76) .

وبتعيين التابع الموجى $\varphi_n(p)$ فى فراغ الاندفاع نستطيع حساب المصفوفية للاحداثى أى :

$$x_{n'n} = \int \varphi^*_{n'} \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}\right) \varphi_n \, dp \qquad (7.83)$$

وكذلك للاندفاع :

$$p_{n'n} = \int \varphi^*_{n'} p \varphi_n \, dp \qquad (7.84)$$

فنحصل على نفس القيم التى وجدناها سابقًا فى التمثيل الاحداثى (انظر (7.68) و (7.69)) .

٣ - التمثيل المصفوفى

نستطيع الوصول إلى العلاقات التبادلية (7.50) فى الميكانيكا الكوانتية إذا عبرنا عن المؤثرين الاندفاعى والاحداثى بمصفوفات لا تبادلية مع بعضها البعض ، فإذا رمزنا للمقادير المصفوفية بأقواس صغيرة فيمكن كتابة (7.50) وهاملتونيان الهزاز التوافقى (7.49) بالشكل التالى :

$$(px) - (xp) = \frac{\hbar}{i} I \qquad (7.85)$$

$$(H) = \frac{(p)^2}{2m_0} + \frac{m_0\omega^2}{2} (x)^2 \qquad (7.86)$$

حيث I مصفوفة الواحدة (الوحدة) . وبالمناسبة . إن قوانين الميكانيكا الكوانتية صيغت من قبل هايزنبرج لأول مرة بواسطة معادلات مصفوفية تعطى كلا من (x) ، (p) و (H) . وتوخيا للاختصار سنستعمل نفس العناصر المصفوفية التى حسبناها فى حالة الهزاز التوافقى وسنبرهن أنها تحقق العلاقة (7.85) ، ثم سنحسب طيف الطاقة بواسطة (7.86) . إذ يبدو أن

حل المعادلة (7.85) هو عبارة عن مصفوفات مؤلفة من العناصر المصفوفية للاحداثى والاندفاع التى حصلنا عليها فى التمثيل - x والتمثيل - p . فيما نؤلف العناصر المصفوفية (7.68) و (7.69) مصفوفتين* لا متناهيتين شبه قطريتين :

$$(x)=\begin{pmatrix} x_{00} & x_{01} & x_{02} & \cdots \\ x_{10} & x_{11} & x_{12} & \cdots \\ x_{20} & x_{21} & x_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}=x_0\begin{vmatrix} 0 & \sqrt{1/2} & 0 & 0 & 0 \ldots \\ \sqrt{1/2} & 0 & \sqrt{2/2} & 0 & 0 \ldots \\ 0 & \sqrt{2/2} & 0 & \sqrt{3/2} & 0 \ldots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix} \quad (7.87)$$

$$(p)=\begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} & p_{02} & \cdots \\ p_{10} & p_{11} & p_{12} & \cdots \\ p_{20} & p_{21} & p_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}=$$

$$=m_0\omega x_0\begin{vmatrix} 0 & -i\sqrt{1/2} & 0 & 0 & 0 \ldots \\ i\sqrt{1/2} & 0 & -i\sqrt{2/2} & 0 & 0 \ldots \\ 0 & i\sqrt{2/2} & 0 & -i\sqrt{3/2} & 0 \ldots \end{vmatrix} \quad (7.88)$$

وهاتان المصفوفتان هيرميتيتان لأنهما تحققان العلاقة :

$$p_{n'n}=p^*_{nn'}$$

ولما كانت العناصر المصفوفية لجداء مصفوفتين تساوى مجموع جداء السطر فى العمود ، أى أن :

$$(px)_{n'n}=\sum_{\kappa=0}^{\infty} p_{n'\kappa}x_{\kappa n}, \quad (7.89)$$

ونجد بالاستناد إلى (7.87) و (7.88) أن

$$(px)_{n'n}-(xp)_{n'n}=\sum_{\kappa}(p_{n'\kappa}x_{\kappa n}-x_{n'\kappa}p_{\kappa n})=\frac{\hbar}{i}\delta_{nn'} \quad (7.90)$$

أى أن القسم الأيمن من هذه المساواة يشكل مصفوفة الواحدة مضروبة

---

* نلاحظ أن معرفة جملة العناصر المصفوفية

$$F_{n'n}=\int \psi^*_{n'}F\psi_n d^3x$$

للمؤثر F تعطى وصفا للمؤثر F فى تمثيل الطاقة أيضا (بشرط أن تكون ψ_n - التوابع الخاصة للمؤثر H) .

بـ * $\hbar/i$ ولذلك تتحقق العلاقة الكوانتية الأساسية (7.85) فى التمثيل المصفوفى . ولنحسب الآن العنصر المصفوفى للهاملتونيان (7.86) الذى يساوى

$$H_{n'n} = \sum_{\kappa} \left(\frac{1}{2m_0} p_{n'\kappa} p_{\kappa n} + \frac{m_0 \omega^2}{2} x_{n'\kappa} x_{\kappa n} \right)$$

فإذا عوضنا عن العناصر المصفوفية للاحداثى والاندفاع من (7.87) و (7.88) نجد أن :

$$H_{n'n} = \hbar\omega (n + {}^1/_2) \delta_{n'n}$$

وعليه يؤلف الهاملتونيان (H) المصفوفة القطرية التالية :

$$(H) = \hbar\omega \begin{pmatrix} {}^1/_2 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & {}^3/_2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & {}^5/_2 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \qquad (7.91)$$

وعندما تؤلف القيمة المدروسة مصفوفة قطرية فإن ذلك يعنى فى لغة معادلة شرودينجر الموجية ، أن للمؤثر المعطى طيف ذو قيم خاصة يتعين بعناصر قطرية . وعليه نجد فى مثال الهزاز التوافقى أن أنواع التمثيل كلها (التمثيل - x ، التمثيل - p ، والتمثيل المصفوفى) تعطى نفس النتيجة للعناصر المصفوفية (للاحداثى والاندفاع والطاقة) . غير أنه عند ظهور الميكانيكا الكوانتية تبين أن الطريقتين المصفوفية والموجية لا تعطيان نفس النتائج ، إلا أن الأبحاث الأخيرة أثبتت تطابقهما العام .

٤ - مفهوم متجه (شعاع) الحالة الكوانتية

ثمة طريقة أكثر تعميمًا ، تسمح بصياغة الموضوعات الأساسية فى الميكانيكا الكوانتية دون اللجوء إلى أى تمثيل معين ، وهى مبنية على مفهوم

* إلا أنه من الناحية المنطقية بالعكس ، يجب أن نستخلص من المساواة (7.90) معتمدين على (7.69) المصفوفتين (7.87) و (7.88) .

متجه حالة الجملة الكوانتية الذى ينتمى إلى فراغ مجرد يسمى بفراغ هيلبرت ويتعلق هذا المتجه باختيار الأعداد الكوانتية n الموافقة للقيم الخاصة للمؤثرات التبادلية التى تصف الحالة الميكانيكية الكوانتية للجملة . وسنرمز كما فعل ديراك لمتجه الحالة بقوس زاو :

$$|\psi\rangle - ket \quad \text{المتجه} \tag{7.92}$$

أو بالشكل $|n\rangle$ مع الاشارة الواضحة إلى الاعداد الكوانتية (حيث يعبر n عن الاختيار f من الأعداد الكوانتية $(n_1, \ldots, n_f)$. ولندخل أيضًا مفهوم المتجه الاقترانى

$$\langle\psi| - bra \quad \text{المتجه} \tag{7.93}$$

الذى يرتبط مع المتجه $|\psi\rangle$ ارتباطًا وحيد القيمة وينتمى إلى فراغ اقترانى* . أما الجداء العددى للمتجهين $|\psi\rangle$ و $|\varphi\rangle$ بدلالة الرموز المذكورة فيكتب بالشكل التالى :

$$\langle\psi|\varphi\rangle \tag{7.94}$$

وعندئذ يعتبر التابع الموجى للجملة $\psi_n(x)$ فى التمثيل - x ، سعة للكثافة الاحتمالية لتوضع الجسم $|\psi_n(x)|^2$ ويكتب وفقًا لرموز ديراك كما يلى :

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle \quad (\psi_n^*(x) = \langle n|x\rangle) \tag{7.95}$$

لذا فهو يعبر عن التمثيل الاحداثى لمتجه الحالة $|n\rangle$ ، ونحصل طبقًا لذلك على التابع الموجى فى التمثيل - p ، أى أن :

$$\varphi_n(p) = \langle p|n\rangle \tag{7.95a}$$

أى التمثيل الاندفاعى للمتجه $|n\rangle$. اما من وجهة النظر الرياضية فتصبح المقادير $\langle x|n\rangle$ مركبات للمتجه $|n\rangle$ على القاعدة $|x\rangle$ أى أن :

* لقد أدخل ديراك التسميتين برا (-bra) وكيت (-cket) وهما المقطعان الأول والأخير من الكلمة الانكليزية bracket التى تعنى قوس .

$$|n\rangle = \int |x\rangle \langle x|n\rangle \, dx = \int |x\rangle \psi_n(x) \, dx \qquad (7.96)$$

وتمثل متجهات هذه القاعدة $\langle x|$ التوابع الخاصة للمؤثر الاحداثى :

$$x|x'\rangle = x'|x'\rangle \qquad (7.96a)$$

ويمكن دراسة العبارة $\langle x|n\rangle$ كعنصر مصفوفى رقمت سطوره باستمرار بواسطة المتحولات x كما رقمت أعمدته بالوسيط n . وبتكامل الكثافة الاحتمالية :

$$|\psi_n(x)|^2 = \langle n|x\rangle \langle x|n\rangle \qquad (7.97)$$

بالنسبة لـ x نحصل على الاحتمال الكلى الذى يساوى

$$\int |\psi_n(x)|^2 \, dx = \int \psi_n^*(x) \psi_n(x) \, dx =$$

$$= \int \langle n|x\rangle \langle x|n\rangle \, dx = \langle n|n\rangle = 1 \qquad (7.98)$$

وعليه ، نلاحظ أن القيمة السابقة لاتتوقف على نوع التمثيل لأننا نجد فى التمثيل ـ p أيضًا أن :

$$\int |\varphi_n(p)|^2 \, dp = \langle n|n\rangle = 1 \qquad (7.99)$$

ومن الواضح عندئذ ، أن شرط التعامد والمعايرة للتوابع الموجبة ψ_n ، $\psi_{n'}$ يكتب بالشكل التالى :

$$\int \psi_{n'}^*(x) \psi_n(x) \, dx = \int \langle n'|x\rangle \langle x|n\rangle \, dx = \langle n'|n\rangle = \delta_{n'n} \qquad (7.100)$$

وهذا يعنى تعامد ومعايرة المتجهين $\langle n|$ و $\langle n'|$ ، وأن جملة المتجهات $\langle n|$ ، طبقًا للفرضية الأساسية فى الميكانيكا الكوانتية ، يجب أن تكون تامة ، وهذا يعنى إمكانية نشر أية حالة $\langle \psi|$ بشكل تراكب للحالات $\langle n|$ أى أن :

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle \qquad (7.101)$$

حيث يتم الجمع بكل القيم الممكنة التى يأخذها العدد الكوانتى n ، وعليه فإن

شرط امتلاء (استكمال) جملة الحالات الكوانتية $|n\rangle$ يكتب بالمساواة التالية :

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = I \qquad (7.102)$$

حيث I مؤثر واحدى . وإذا اخترنا التمثيل - x نجد أن:

$$\langle x|\psi\rangle = \sum_n \langle x|n\rangle\langle n|\psi\rangle \qquad (7.103)$$

أو بالشكل الصريح ، أنظر أيضًا (6.16) ، نكتب :

$$\psi(x) = \sum_n C_n \psi_n(x) \qquad (7.104)$$

ويمكن كتابة العناصر المصفوفية $A_{n'n}$ لمؤثر ما A يؤثر على متجه الحالة $|n\rangle$ ، برموز ديراك بالشكل* $\langle n'|A|n\rangle$. ونرى أنه عند كتابة العناصر المصفوفية بشكل أقواس ديراك $\langle n'|A|n\rangle$ فإننا نستعمل كلا من المؤثر ومتجه الحالة بشكليهما المجرد وبدون اختيار أى تمثيل ، وعند حساب العناصر المصفوفية يمكن اختيار تمثيل معين للمؤثر A وللمتجهين $|n\rangle$ و $|n\rangle$ ، فمثلا فى التمثيل x حيث

$$\langle x'|A|x\rangle = \delta(x'-x)\,A(x), \quad \langle x|n\rangle, \quad \langle x|n'\rangle$$

نحصل على

$$\langle n'|A|n\rangle = \int \langle n'|x'\rangle\langle x'|A|x\rangle\langle x|n\rangle\,dx\,dx' =$$
$$= \int \langle n'|x\rangle A(x)\langle x|n\rangle\,dx = \int \psi^*_{n'}(x)\,A(x)\,\psi_n(x)\,dx = A_{n'n} \qquad (7.105)$$

وهو ما يتطابق مع عنصر المصفوفة (7.62) .وكما سنرى فيما بعد فى مثال الهزاز التوافقى ليس بالضرورة استعمال مجموعة التوابع الموجية ψ_n و $\varphi_n(p)$ وإنما يكفى معرفة الخواص العامة للمؤثرات ومتجهات الحالة الكوانتية المستقلة عن أى تمثيل معين ، وبمعرفة العناصر المصفوفية لمؤثرين A و B يمكن حساب العناصر المصفوفية لجدائهما AB طبقًا لشرط

---

* سنحافظ من أجل المصفوفة القطرية على الرمز $\langle n|A|n\rangle \equiv \langle A\rangle$ ، انظر (6.4) .

استكمال المجموعة الكوانتية $\langle n|$ ، أى (7.102) ، حسب العلاقة :

$$\langle n'|AB|n\rangle = \langle n'|AIB|n'\rangle = \sum_{n''} \langle n'|A|n''\rangle\langle n''|B|n\rangle \quad (7.106)$$

ومنه وكما أشرنا سابقًا (7.89) هناك عملية ضرب مصفوفتين (A) و (B) مقابلتين للمؤثر ين A و B يعبر عنها بالتمثيل المصفوفى .

لنحل الآن مسألة الهزاز التوافقى دون اللجوء إلى أى تمثيل معين ، لذا نكتب مؤثر هاملتون للهزاز التوافقى الخطى بالشكل التالى :

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{m_0\omega^2 x^2}{2} \quad (7.107)$$

وندخل المؤثرين a و a^+ اللذين يعبران خطيًا عن p و x أى أن :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} + i\frac{x_0}{\hbar}p\right), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} - i\frac{x_0}{\hbar}p\right) \quad (7.108)$$

حيث

$$x_0 = \sqrt{\hbar/m_0\omega}$$

وبما أن المؤثرين x و p هرميتيان ، فإن المؤثر a^+ سيكون المؤثر الهيرميتى المرافق للمؤثر a. وإذا استخدمنا المبد ل :

$$px - xp = -i\hbar \quad (7.109)$$

نجد أن :

$$[a, a^+] = aa^+ - a^+a = 1 \quad (7.110)$$

ويمكن الآن كتابة مؤثر هاملتون (7.107) بواسطة المؤثرين a و a^+ فى (7.108) اللذين يحققان شرط التبادل (7.110) بالشكل التالى :

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(aa^+ + a^+a) = \hbar\omega(a^+a + 1/2) \quad (7.111)$$

ومن الواضح أن :

$$Ha^+ = a^+(H + \hbar\omega) \quad (7.112)$$

وعليه فإن :

$$H(a^+)^n = a^+(H+\hbar\omega)(a^+)^{n-1} = \ldots = (a^+)^n(H+n\hbar\omega) \qquad (7.113)$$

حيث $n = 0, 1, 2, \ldots$.

وإذا فرضنا وجود حالة كوانتية $\langle 0|$ بحيث تتحقق :

$$a|0\rangle = 0 \qquad (7.114)$$

نجد :

$$H|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}|0\rangle \qquad (7.115)$$

أى أن $\langle 0|$ هو المتجه الخاص لـ H المقابل للقيمة الخاصة $\hbar\omega/2$. ولندرس الآن متجه الحالة :

$$(a^+)^n|0\rangle \quad (n=0, 1, 2, 3, \ldots) \qquad (7.116)$$

الذى يعتبر طبقا للعلاقة (7.113) ، متجها خاصا لـ H أى

$$H(a^+)^n|0\rangle = \hbar\omega(n+{}^1\!/_2)(a^+)^n|0\rangle \qquad (7.117)$$

وهو يقابل القيمة الخاصة $\hbar\omega(n+{}^1\!/_2)$. ان القيم الخاصة للمؤثر a^+a هى قيم صحيحة $n \geqslant 0$ لذا لا يمكن للمؤثر a^+a أن يأخذ قيما خاصة سالبة λ لأن :

$$\lambda = \langle\lambda|a^+a|\lambda\rangle = \int\langle\lambda|a^+|x\rangle\langle x|a|\lambda\rangle\,dx =$$

$$= \int|\langle x|a|\lambda\rangle|^2\,dx \geqslant 0 \qquad (7.118)$$

عندما تكون المتجهات الخاصة معايرة على الواحد أى $1 = \langle\lambda|\lambda\rangle$. ولنرمز للمتجهات الخاصة المعايرة على الواحد للمؤثر H ، والتى تقابل القيم الخاصة $\hbar\omega(n+{}^1\!/_2)$ ، بالرمز $|n\rangle \; (\langle n|n\rangle = 1, \; n = 0, 1, 2, \ldots)$ ومن الواضح أنها تختلف بالعوامل العددية c عن المتجهات (7.116) أى أن :

$$|n\rangle = C(a^+)^n|0\rangle \qquad (7.119)$$

ومنه نكتب شرط المعايرة :

$$1 = \langle n | n \rangle = C^* C \langle 0 | \underbrace{aa \ldots a}_{n} \underbrace{a^+ a^+ \ldots a^+}_{n} | 0 \rangle \qquad (7.120)$$

وبنقل كل المؤثرات a إلى اليمين وتجميعها بالتالى مع المؤثرات a^+ واستخدام العلاقة (7.114) نجد أن :

$$1 = C^* C n! \langle 0 | 0 \rangle = C^* C n! \qquad (7.121)$$

أى أنه يمكن اختيار قيمة حقيقية لـ C تساوى $C = 1/\sqrt{n!}$ وبالتالى تكون المتجهات المعايرة الخاصة للمؤثر H مساوية إلى :

$$| n \rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}} | 0 \rangle \qquad (7.122)$$

ومنه نستخلص العناصر المصفوفية التى لا تساوى الصفر ، أى أن :

$$\langle n-1 | a | n \rangle = \langle n | a^+ | n-1 \rangle = \sqrt{n} \qquad (7.123)$$

وبتعويض a و a^+ بقيمتهما (7.108) نجد أن :

$$\langle n-1 | x | n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n}{2}}, \quad \langle n+1 | x | n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}}$$
$$\langle n-1 | p | n \rangle = -i m_0 \omega \langle n-1 | x | n \rangle$$
$$\langle n+1 | p | n \rangle = i m_0 \omega \langle n+1 | x | n \rangle \qquad (7.124)$$

ويعنى ذلك أننا حصلنا على نفس العنصرين المصفوفيين $x_{n'n}$ و $p_{n'n}$ ، المستخرجين من التمثيل - x ، انظر (7.68) و (7.69) ، للتوابع الموجية للهزاز ، كما نستطيع أن نبرهن أن الحالة التى أدخلناها تعطى التوابع الموجية المعروفة للهزاز التوافقى (7.41) فى التمثيل - x ، ولذلك نستفيد من تعريف الحالة الأساسية (7.114) لكتابة المؤثر a فى التمثيل - x أى أن :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right), \quad \xi = \frac{x}{x_0}$$

ومنه نحصل لحساب التابع الموجى $\psi_0(x)=\langle x|0\rangle$ على المعادلة التالية :

$$\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right)\psi_0=0$$

التى حلها :

$$\psi_0=C_0e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

هذا الحل الذى يمكن معايرته على الواحد بالشكل التالى :

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^2\,dx=x_0C_0^2\int_{-\infty}^{\infty}(e^{-\frac{1}{2}\xi^2})^2\,d\xi=x_0C_0^2\sqrt{\pi}=1$$

ومنه نجد $C_0=1/\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}$، وهذه النتيجة تتطابق مع الصيغة (7.41) للتابع الموجى عندما $n=0$ وتنتج التوابع الموجية للحالات المهيجة* $\psi_n(x)=\langle x|n\rangle$ من تابع الحالة الأساسية $\psi_0(x)$ حسب العلاقة (7.122) بعد الانتقال إلى التمثيل الاحداثى مثلا نجد للحالة المهيجة الأولى $n=1$ المعادلة

$$\psi_1=a^+\psi_0=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)\frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}e^{-\xi^2/2}=\frac{2}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}}\xi e^{-\xi^2/2}$$

التى تتطابق تماما مع الصيغة (7.41) .

هـ) تبعية التمثيلات المختلفة لاستقرارية متجه الحالة . لنستعمل رموز ديراك لشرح ماهية تغير العنصر المصفوفى $\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle$ لمؤثر ما A بالنسبة للزمن t ، كما هو الحال بالنسبة للاحداثيات x ، إذ توجد عدة تمثيلات توافق الارتباطات المختلفة لمتجه الحالة والمؤثرات بالزمن .

---

* نلاحظ أن الحالات ، التى فرضناها فى الفقرة جـ من هذا البند ، تحقق حل مسألة القيم الخاصة

$$a|\alpha\rangle=\alpha|\alpha\rangle$$

أى أنها تعتبر حلا للمعادلة :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0}+\frac{ix_0}{\hbar}p\right)\psi_\alpha(x)=\alpha\psi_\alpha(x)$$

١ ـ تمثيل شرودينجر وهايزنبرج

لنفرض أن المؤثر A مستقل عن الزمن بصورة صريحة $(\partial A/\partial t = 0)$ بينما يتعلق التابع الموجي $|\psi(t)\rangle$ و $\langle\varphi(t)|$ بالزمن وفقا لمعادلتي شرودينجر التاليتين : من أجل المتجه ـ كيت

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \qquad (7.125)$$

ومن أجل المتجه ـ برا

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\varphi(t)| = \langle\varphi(t)| H^+$$

ولهذا يصبح العنصر المصفوفى فى الحالة العامة تابعا للزمن t ، ولما كان مؤثر هاملتون $H^+ = H$ هيرميتيا،لذا يمكن كتابة المعادلة الأخيرة بالشكل التالى :

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\varphi(t)| = \langle\varphi(t)| H \qquad (7.126)$$

وبملاحظة المعادلتين (7.125) و (7.126) ومعرفة أن المؤثر A لا يتعلق بالزمن $(\partial A/\partial t = 0)$ نحصل من أجل العنصر المصفوفى على المعادلة التالية :

$$\frac{d}{dt} \langle\varphi(t)| A |\psi(t)\rangle =$$

$$= \langle\varphi(t)| A \frac{1}{i\hbar} H |\psi(t)\rangle - \langle\varphi(t)| HA \frac{1}{i\hbar} |\psi(t)\rangle =$$

$$= \langle\varphi(t)| \frac{i}{\hbar} [H, A] |\psi(t)\rangle \qquad (7.127)$$

وفى الحالة الخاصة $\psi(t) = \varphi(t)$ نحصل على الصيغة المعروفة (6.43) لحساب مشتقة القيمة الوسطى بالنسبة للزمن . أما من أجل الحالتين الجديدتين اللتين لا تتعلقان بالزمن $|\psi_H\rangle$ و $\langle\varphi_H|$ فنحصل أيضا على الحالات السابقة المستقلة عن الزمن بواسطة تأثير مؤثر ما $U(t)$ أى أن :

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi_H\rangle$$
$$\langle\varphi(t)| = \langle\varphi_H| U^+(t) \qquad (7.128)$$

ولكى يتحقق ذلك لا بد أن يحقق المؤثر $U(t)$ المعادلة

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = HU(t) \qquad (7.129)$$

أى أن يحقق نفس معادلة الحالتين $\langle \psi(t)|$ و $\langle \varphi(t)|$ ، والتى يمكن كتابة حلها الشكلى (بشرط أن لا يتعلق H بوضوح بالزمن) كما يلى :

$$U(t) = e^{-(i/\hbar)Ht} \qquad (7.130)$$

والذى يعتبر مؤثرا منشورا فى متسلسلة أسية :

$$U(t) = 1 - \frac{i}{\hbar} Ht + \frac{1}{2!}\left(\frac{i}{\hbar} Ht\right)^2 - \ldots \qquad (7.131)$$

عدا ذلك يمكن اختيار الثابت فى الحل (7.130) بحيث يتطابق $\langle \psi(t)|$ فى اللحظة الابتدائية مع $\langle \psi_H|$. وبتعويض (7.128) فى المساواة (7.127) وملاحظة المساواة (7.129) نجد أن :

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi_H | U^+(t) AU(t) | \psi_H \rangle = \langle \varphi_H | U^+ \frac{i}{\hbar}[H, A] U | \psi_H \rangle \quad (7.132)$$

ولندخل الآن مؤثرا جديدا $A_H(t)$ يرتبط مع المؤثر السابقAبالتحويل التالى :

$$A_H(t) = U^+AU = e^{iHt/\hbar} A e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \qquad (7.133)$$

والمؤثر $A_H(t)$ يتعلق بالزمن خلافا للمؤثر A (7.132) ويحقق المعادلة

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = \frac{i}{\hbar} [H, A_H(t)] \qquad (7.134)$$

ومن الواضح أننا نستطيع استنتاج هذه المعادلة باشتقاق التعريف (7.133) بالنسبة للزمن . وعليه يمكن حساب العناصر المصفوفية بدقة،كما فى حالة القيم الوسطى،فى تمثيلين مختلفين يتميزان عن بعضهما بوجود الزمن . ويسمى التمثيل الذى تتعلق فيه الحالة $\langle \psi(t)|$ بالزمن بصورة صريحة ويخضع لمعادلة شرودينجر (7.128) ولا يتعلق فيه المؤثر A بالزمن

بتمثيل شرودينجر . وإذا نقلت تبعية الزمن إلى المؤثر $\Lambda_H(t)$ طبقا لـ (7.133) ، وتبقى الحالات $\langle\psi_H|$ التى تستخرج من $\langle\psi(t)|$ بواسطة المؤثر العكسى U^{-1} حسب المعادلات

$$|\psi_H\rangle = U^{-1}(t)\,|\psi(t)\rangle = e^{\frac{iH}{\hbar}t}\,|\psi(t)\rangle \qquad (7.135)$$

مستقرة بالنسبة للزمن ولذلك يسمى التمثيل عندئذ بتمثيل هايزنبرج.وفى كلتا الحالتين ، وبحكم ما يسمى بوحدانية المؤثر U ، انظر أيضا (6.47) ، نكتب المعادلة

$$U^{+} = U^{-1} \qquad (7.136)$$

التى تبرهن صحتها استنادا إلى التعريف (7.130) وهيرميتية H .
وفى كلتا الحالتين نحصل على نفس العنصر المصفوفى

$$\langle\varphi(t)\,|A|\,\psi(t)\rangle = \langle\varphi_H\,|U^{+}UA_HU^{+}U\,|\psi_H\rangle = \langle\varphi_H\,|A_H\,|\psi_H\rangle \qquad (7.137)$$

٢ ـ تمثيل التأثير المتبادل

يمكن أحيانا تقسيم الجملة الكوانتية إلى عدة جمل (جمل جزئية) توصف إذا أهملنا التأثير المتبادل فيما بينها ، بالهاملتونيان H الذى يسمى الهاملتونيان الحر . وعندئذ نستطيع كتابة الهاملتونيان الكلى دون اهمال التأثير المتبادل بين الجمل الجزئية بشكل مجموع للهاملتونيان الحر H_0 وما يسمى بهاملتونيان التأثير V،أى أن :

$$H = H_0 + V \qquad (7.138)$$

ومن المناسب عندئذ الانتقال إلى تمثيل جديد يعزل فيه بشكل صريح

الهاملتونيان التفاعل (التأثير المتبادل) ، ولهذا نربط متجه الحالة

$\rangle(t)\psi|$ فى تمثيل شرودينجر بمتجه جديد $\rangle(t)_I\psi|$ بو سطة مؤثر واحدى (وحدانى) :

$$U_0 = e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}, \quad U_0^+ = U_0^{-1} = e^{iH_0t/\hbar} \qquad (7.139)$$

بحيث يكون

$$|\psi_I(t)\rangle = U_0^{-1}|\psi(t)\rangle = e^{iH_0t/\hbar}|\psi(t)\rangle \qquad (7.140)$$

وعندئذ لكى لا تتغير العناصر المصفوفية لمؤثر ما A عند الانتقال إلى الحالات الجديدة (7.140) المحسوبة بواسطة الحالات $\rangle(t)\psi|$ حسب العلاقة

$$\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \langle\psi_I(t)|A_I(t)|\psi_I(t)\rangle$$

من الضرورى تحويل المؤثر نفسه حسب القانون

$$A_I(t) = e^{iH_0t/\hbar}Ae^{-iH_0t/\hbar} \qquad (7.141)$$

وكتابة مؤثر التفاعل ، طبقا لـ (7.141) ، بالتمثيل الجديد كما يلى :

$$V_I(t) = e^{iH_0t/\hbar}Ve^{-iH_0t/\hbar} \qquad (7.142)$$

ويسمى تمثيل متجهات الحالة والمؤثرات المعطاة بالمعادلتين (7.140) و (7.141) بتمثيل التأثير المتبادل . فإذا أثرنا على الحالة الجديدة $\rangle(t)_I\psi|$ بالمؤثر $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ واستفدنا من معادلة شرودينجر للمتجه $\rangle(t)\psi|$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \qquad (7.143)$$

فإننا نجد أن :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle = -H_0e^{iH_0t/\hbar}|\psi(t)\rangle + e^{iH_0t/\hbar}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = e^{iH_0t/\hbar}V|\psi(t)\rangle$$

بالانتقال إلى المؤثر $V_I(t)$ بواسطة المساواة (7.142) نكتب أخيرا معادلة متجه الحالة فى تمثيل التأثير المتبادل بالشكل التالى :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle = V_I(t)|\psi_I(t)\rangle \qquad (7.144)$$

التى تخلو من الهاملتونيان الحر H_0 . وباشتقاقنا للتعريف (7.141) بالنسبة للزمن نجد المعادلة التى يخضع لها أى مؤثر اختيارى فى تمثيل التأثير المتبادل :

$$\frac{dA_I(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H_0, \ A_I(t)] \qquad (7.145)$$

وعليه ، فإن متجهات الحالة توصف فى تمثيل التأثير المتبادل بمعادلات مشابهة لمعادلة شرودينجر التى يكون فيها الهاملتونيان مقتصرا على هاملتونيان التأثير المتبادل $V_I(t)$ أما المؤثرات فتخضع لمعادلات هايزنبرغ ذات الهاملتونيان الحر H_0 .

وتعتبر التحويلات من تمثيل شرودينجر إلى تمثيل هايزنبيرج أو تمثيل التأثير المتبادل ، والتى تتم بواسطة المؤثرين الوحدانيين (7.130) و (7.139) ، حالات خاصة من التحويلات الوحدانية العامة التى لا تغير العناصر المصفوفية . وبما أن المقادير المقاسة فى أى تجربة هى ، فى الحقيقة ، العناصر المصفوفية والقيم الوسطى وليست متجهات الحالة أو المؤثرات ، فيمكن ، عند اجراء الحسابات اختيار هذا التمثيل أو ذلك تبعاً لنوعية المسائل المطروحة .

البند ٨ ـ نظرية الاضرابات

أ) **صياغة المسألة** . تبين لنا مما سبق أنه فى الميكانيكا الكوانتية يمكن حل مسائل قليلة بشكل دقيق ، منها مثلا مسألة الهزاز التوافقى ، ولذلك نضطر لحل المعادلة الموجية فى حالات كثيرة إلى اللجوء إلى طرائق تقريبية ، أهمها طريقة الاضطراب التى تطبق عندما يمكن تقسيم الطاقة الكامنة V للتأثير المتبادل للجسيم إلى حدين ، أى أن :

$$V = V_O + V'$$

إذ يمكن اختيار الطاقة الكامنة V_0 عندئذ بحيث يكون لمعادلة شرودينجر ذات الهاملتونيان $H_0 = T + V_0$ حل دقيق ، وتعطى طاقة الاضطراب V' تصحيحا صغيرا لحل المعادلة الأساسية ذات الكمون V_0 فيما يكون الحساب المتتالى لهذه التصحيحات (التقريب الأول ، الثانى ، الثالث ... إلخ) نشرا بواسطة بارامتر صغير . وتحتوى الميكانيكا الكوانتية على نماذج عديدة لطريقة الاضطراب أهمها : طريقة شرودينجر أو النظرية المستقرة للاضطرابات التى تطبق عندما تكون طاقة الاضطراب مستقلة عن الزمن ، أو عندما يمكن حذف الزمن من المعادلة بواسطة وسيط ما ، وتسمح هذه الطريقة بحساب تصحيح طيف طاقة الجملة فى المسائل المستقرة . أما النظرية غير المستقرة للاضطرابات (طريقة ديراك) فتطبق أثناء ايجاد الحل التقريبى للمسائل التى يتعلق فيها الاضطراب بالزمن بصورة صريحة ، وهى تساعدنا فى حساب احتمال انتقال الجملة من حالة مستقرة إلى أخرى كما أنها تطبق فى نظريتى الاشعاع والتبدد ، انظر البندين ٩ و ١٥ مثلا .

ب) المعادلات الأساسية للنظرية المستقرة للاضطرابات (نظرية شرودينجر) . لنشرح الآن طريقة نظرية الاضطرابات التى تطبق فى حالات المسائل المستقرة عندما لا يتعلق هاملتونيان الجملة بالزمن أى أنه من الشكل التالى :

$$H = T + V = T + V^0 + V' \qquad (8.1)$$

عندئذ يمكن اختيار طاقة الاضطراب V' والطاقة الكامنة V^0 بحيث يكون لمعادلة شرودينجر

$$(E - H)\psi = 0 \qquad (8.2)$$

باهمال الاضطراب V' ، حل دقيق يميز بالمقدارين E^0 و ψ^0 . فإذا رمزنا

لـ $V^0 + T$ بالرمز H^0 (التقريب الصفرى) وأخذنا بعين الاعتبار (8.1) نرى أن (8.2) تصبح كما يلى :

$$(E - H^0 - V')\psi = 0 \qquad (8.2a)$$

وتتلخص المسألة الآن فى حساب القيمة E_n والتابع الموجى الموافق لها ψ_n من هذه المعادلة (ولو تقريبا) دون اهمال الطاقة V' . ويمكن البحث عن الحل طبقا لنظرية الاضطرابات بشكل سلسلتين هما :

$$\psi = \psi^0 + \psi' + \psi'' + \ldots$$

$$E = E^0 + E' + E'' + \ldots \qquad (8.3)$$

حيث ψ' و E' هما مقداران لامتناهيان فى الصغر من المرتبة الأولى بالقياس إلى ψ^0 و E^0 أما ψ'' و E'' فهما لامتناهيان فى الصغر من المرتبة الثانية . . . وهكذا ، ويمكن ، أحيانا ، تمثيل طاقة الاضطراب V' كجداء للطاقة من المرتبة V^0 بوسيط صغير $\lambda(\lambda \ll 1)$. وعندئذ يجب أن يكون الحل (8.3) نشرا بالوسيط العنصرى λ أى أن E^0 و ψ^0 لا يمكن أن يتعلقا بـ λ أما E' و ψ' فهما متناسبان مع λ و E'' و ψ'' ومتناسبان مع λ^2 . . .

وهكذا ، وبتعويض (8.3) فى (8.2a) نحصل على المعادلة :

$$(E^0 + E' - H^0 - V')(\psi^0 + \psi') = 0 \qquad (8.4)$$

وبتجميع الحدود ذات المراتب المتماثلة فى الصغر نجد أن

$$(E^0 - H^0)\psi^0 + [(E' - V')\psi^0 + (E^0 - H^0)\psi'] + (E' - V')\psi' = 0 \qquad (8.4a)$$

جـ) **التقريب الأول** . للحصول على التقريب الأوّل لنظرية الاضطرابات يجب اهمال الحدود ذات المرتبة الثانية فى الصغر فى المعادلة (8.4a) واعتبار أنه فى التقريب الصفرى تتحقق المعادلة التالية :

$$(E^0 - H^0)\psi^0 = 0 \qquad (8.5)$$

ومن المعادلة الأخيرة يمكن حساب كل القيم الخاصة

$$E_1^0, E_2^0, E_3^0, \ldots, E_n^0, \ldots$$

والتوابع الخاصة

$$\psi_1^0,\ \psi_2^0,\ \psi_3^0,\ \ldots,\ \psi_n^0,\ \ldots$$

المرتبطة ببعضها بالمعادلة التالية :

$$(E_{n'}^0 - \mathrm{H}^0)\,\psi_{n'}^0 = 0 \qquad (8.6)$$

ولننتقل بعد أن نأخذ بعين الاعتبار ما سبق ، إلى دراسة معادلة التقريب الأول فى نظرية الاضطرابات ، أى :

$$(E^0 - \mathrm{H}^0)\,\psi' = -\,(E' - V')\,\psi^0 \qquad (8.7)$$

ولنفرض أنه عند غياب الاضطراب ، كانت الجملة فى حالة كوانتية معينة $n' = n$ وبما أن $E^0 = E_n^0$ و $\psi^0 = \psi_n^0$ فى التقريب الصفرى لذا لحساب التقريب الأول $E' = E_n'$ و $\psi' = \psi_n'$ ، نحصل على أن :

$$(E_n^0 - \mathrm{H}^0)\,\psi_n' = -\,(E_n' - V')\,\psi_n^0 \qquad (8.7a)$$

وإذا لاحظنا امكانية نشر أى تابع بواسطة مجموعة من التوابع المعايرة المتعامدة عند تحقيق الشروط الحدية نفسها ، انظر (6.16) ، وفى هذه الحالة تكون توابع النشر هى $(\psi_1^0, \psi_2^0, \ldots, \psi_n^0)$ ويمكن البحث عن ψ_n' بالشكل التالى :

$$\psi_n' = \sum_{n'} C_{n'}\psi_{n'}^0 \qquad (8.8)$$

ويجب حساب عوامل النشر $C_{n'}$ فى سلسلة فوربيه المعممة بتبديل (8.8) فى (8.7a) أى أن :

$$\sum_{n'} C_{n'}\,(E_n^0 - \mathrm{H}^0)\,\psi_{n'}^0 = -\,(E_n' - V')\,\psi_n^0 \qquad (8.9)$$

وباعتبار (8.6) نجد أن :

$$\sum_{n'} C_{n'}\,(E_n^0 - E_{n'}^0)\,\psi_{n'}^0 = -\,(E_n' - V')\,\psi_n^0 \qquad (8.9a)$$

د) **الحالة اللامنطبقة (المتباينة).** إذا كانت الجملة المدروسة متباينة أى أن كل قيمة للطاقة E_n^0 تقابل تابعا خاصا واحدا ψ_n^0 ، فإننا بضرب (8.9a) من اليسار بـ ψ_n^{0*} واجراء التكامل فى الفراغ كله نحصل على المعادلة التالية :

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0) \delta_{nn'} = - E_n' + \int \psi_n^{0*} V' \psi_n^0 d^3x \qquad (8.10)$$

حيث اعتبرنا التوابع الخاصة ψ_n^0 معايرة ومتعامدة ، أى تحقق العلاقة :

$$\int \psi_n^{0*} \psi_{n'}^0 d^3x = \delta_{nn'}$$

وبما أن المقدار الموجود فى الطرف الأيسر من (8.10) يساوى الصفر (لأنه عندما $n' = n$ يكون $E_n^0 - E_{n'}^0 = 0$ وعندما $n' \neq n$ يكون $\delta_{nn'} = 0$) لذا فإننا لحساب E'_n (التقريب الأول) نحصل على العبارة التالية :

$$E_n' = V_{nn}', \qquad (8.11)$$

حيث V'_{nn} - عنصر المصفوفة التالى :

$$V'_{nn} = \int \psi_n^{0*} V' \psi_n^0 d^3x \qquad (8.11a)$$

أى أن طاقة الجملة الاضافية E'_n هى القيمة الوسطية لطاقة الاضطراب . لقد حصلنا هنا على عبارة الطاقة الاضافية (8.11) كنتيجة لانعدام الطرف الأيسر فى (8.7a) بعد ضربه بالتابع الموجى ψ_n^{0*} واستكماله فى الفراغ كله ومنه نرى أن الطرف الأيمن للمعادلة غير المتجانسة (8.7a) الذى يكتب اختصارا بالشكل :

$$M\psi = f \qquad (8.12)$$

يجب أن يكون متعامدا مع حل المعادلة المتجانسة المقابلة $M\psi^0 = 0$ أى أن

$$\int \psi^{0*} f \, d^3x = 0 \qquad (8.13)$$

ولحساب العوامل $C_{n'}$ فى المعادلة (8.8) نستخدم العلاقة (8.9a) التى نعيد كتابتها بالشكل التالى :

$$\sum_{n''} C_{n''} (E_n^0 - E_{n''}^0) \psi_{n''}^0 = - (E_n' - V') \psi_n^0$$

وإذا ضربناها من اليسار بـ $\psi_{n'}^{0*} (n' \neq n)$ وأخذنا بعين الاعتبار شرط المعايرة والتعامد فسنجد بعد الاستكمال فى الفراغ كله أن :

$$C_{n'} = \frac{V'_{n'n}}{E_n^0 - E_{n'}^0} \qquad (8.14)$$

حيث

$$V'_{n'n} = \int \psi_{n'}^{0*} V' \psi_n^0 d^3x \qquad (8.15)$$

ومنه نحصل على صيغة ψ'_n التالية :

$$\psi'_n = C_n \psi_n^0 + \sum_{n'}{}' C_{n'} \psi_{n'}^0 \qquad (8.16)$$

حيث يدل المجموع على أنه يجب أن يتم الجمع بالنسبة للقيم كلها ما عدا القيمة $n' = n$. وأخيرا يمكن حساب العوامل C_n للتابع الموجى فى التقريب الصفرى من شروط معايرة التابع الموجى الكلى ψ_n ، أى أن :

$$\int \psi_n^* \psi_n d^3x = 1 \qquad (8.17)$$

حيث

$$\psi_n = \psi_n^0 + \psi'_n = C_n^0 \psi_n^0 + \sum_{n'}{}' C_{n'} \psi_{n'}^0 \qquad (8.18)$$

$$C_n^0 = 1 + C_n \qquad (8.19)$$

وبتبديل (8.18) فى (8.17) نجد باهمال اللامتناهيات فى الصغر من المرتبة الثانية فما فوق أن :

$$| C_n^0 |^2 \int \psi_n^{0*} \psi_n^0 d^3x + \\ + \sum_{n'}{}' \left\{ C_n^{0*} C_{n'} \int \psi_n^{0*} \psi_{n'}^0 d^3x + C_{n'}^* C_n^0 \int \psi_{n'}^{0*} \psi_n^0 d^3x \right\} = 1 \qquad (8.20)$$

وبملاحظة شرط المعايرة والتعامد وبدقة تبلغ مضروبا طوريا نستطيع أن نكتب أن :

$$C_n^0 = 1 \qquad (8.21)$$

أى أن :

$$C_n = 0$$

وهكذا نحصل على عبارة للتابع الموجى فى التقريب الأول لنظرية الاضطرابات :

$$\psi_n = \psi_n^0 + \psi'_n \qquad (8.22)$$

حيث

$$\psi'_n = \sum_{n'}{}' \frac{V'_{n'n}}{E_n^0 - E_{n'}^0} \psi_{n'}^0$$

وبالاعتماد على ذلك وعلى (8.11) أيضا نرى أن قيمتى ψ'_n و E'_n متناسبتان مع طاقة الاضطراب من الدرجة الأولى (أى متناسبة مع الوسيط λ) . ولنلاحظ أن طريقة الاضطراب الموضحة سابقا لا تكون صحيحة إلا عندما يكون أى حد فى النشر (8.3) أصغر مما قبله أو كما يتضح من (8.22) ، يجب أن تتحقق المتراجحة التالية :

$$|V'_{n'n}| \ll |E_n^0 - E_{n'}^0| \qquad (8.22a)$$

وهكذا نرى أن الشرط الضرورى لتطبيق نظرية الاضطرابات هو أن تكون العناصر المصفوفية غير المضطربة لمؤثر الاضطراب صغيرة بالمقارنة مع الفرق بين قيم الطاقة المقابلة للحالات غير المضطربة .

هـ) الحالة المنطبقة (الغامرة) . لنشرح الآن نظرية الاضطراب المستخدمة فى الحالات الغامرة حيث تقابل قيمة واحدة للطاقة E_n^0 فى غياب الاضطراب عددا i من التوابع الخاصة (للتبسيط نأخذ اثنين فقط) هما ($\psi_{n_1}^0$ و $\psi_{n_2}^0$) . عندئذ من الواضح أن كل تركيب خطى لهما يكتب بالشكل التالى :

$$\psi_n^0 = C_1^0 \psi_{n_1}^0 + C_2^0 \psi_{n_2}^0 \qquad (8.23)$$

والذى سيكون حلا للمعادلة الموجية فى التقريب الصفرى أى حلا للمعادلة التالية :

$$(E_n^0 - H^0)\,\psi_n^0 = 0$$

وكما فى الحالة الأولى (الحالة المتباينة) يجب أن يتعامد أى حل خاص للمعادلة المتجانسة (8.6) مع الطرف الأيمن للمعادلة غير المتجانسة .

ولبرهان ذلك نضرب (8.7a) من اليسار بـ $\psi_{n_i}^{0*}$ ونستكمله فى الفراغ كله فنجد (من أجل $i = 1,2$) أن :

$$\int \psi_{n_i}^{0*} (E_n^0 - H^0) \psi_n' d^3x = -\int \psi_{n_i}^{0*} (E_n' - V') \psi_n^0 d^3x \qquad (8.24)$$

وبتطبيق نظرية نقل المشتقات ، انظر (6.14) ، نجد أن :

$$\int \psi_n' (E_n^0 - H^0) \psi_{n_i}^{0*} d^3x = -\int \psi_{n_i}^{0*} (E_n' - V') \psi_n^0 d^3x \qquad (8.25)$$

وإذا لاحظنا أن $\psi_{n_i}^{0*}$ هو حل لمعادلة شرودينجر أى $(E_n^0 - H^0)\psi_{n_i}^{0*} = 0$ نجد أخيرا أن :

$$\int \psi_{n_i}^{0*} (E_n' - V') d^3x \left(C_1^0 \psi_{n_1}^0 + C_2^0 \psi_{n_2}^0\right) = 0 \qquad (8.26)$$

وحتى فى الحالة العامة يمكن أن نفرض أن كل التوابع الخاصة $\psi_{n_i}^0$ معايرة ومتعامدة*. وبما أن

$$\int \psi_{n_i}^{0*} \psi_{n_{i'}}^0 d^3x = \delta_{n_i n_{i'}}$$

نستطيع أن نكتب بدلا عن المعادلة (8.26) ، المعادلة التالية :

$$C_i^0 (E_n' - V_{ii}') = C_{i'}^0 V_{ii'}' \quad (i' \neq i) \qquad (8.27)$$

حيث

$$V_{ii}' = \int \psi_{n_i}^{0*} V' \psi_{n_i}^0 d^3x \qquad (8.28)$$

$$V_{ii'}' = \int \psi_{n_i}^{0*} V' \psi_{n_{i'}}^0 d^3x \qquad (8.29)$$

وبما أن الوسيط i فى (8.27) يأخذ القيمتين 1 أو 2 لذا لحساب قيم الطاقة المجهولة E'_n والمعاملات C_i^0 ، نستخلص جملة المعادلتين المتجانستين التالية :

---

* إن لم تكن التوابع $\psi_{n_i}^0$ معايرة ومتعامدة نستطيع ، عن طريق تحويلات خطية ، تركيب توابع جديدة معايرة ومتعامدة .

$$C_1^0(E'_n - V'_{11}) - C_2^0 V'_{12} = 0$$
$$- C_1^0 V'_{21} + C_2^0(E'_n - V'_{22}) = 0 \qquad (8.30)$$

وبما أن التابع $\psi_{n_l}^0$ يحقق شرط المعايرة التالى :

$$\int \psi_{n_l}^{0*} \psi_{n_l}^0 d^3x = 1 \qquad (8.30a)$$

لذا فإن كلا من التصحيح E'_n للطاقة لحالة الجملة غير المضطربة والمعاملات C_i^0 (وكذلك ψ_n^0) تتعين بشكل أحادى القيمة . وإذا لاحظنا أنه فى الحالة الخاصة عندما يكون للمجموعة (8.30) حل غير الصفر عند انعدام معين أمثالها فيمكن أن نحصل لحساب E'_n على المعادلة التالية :

$$\begin{vmatrix} (E'_n - V'_{11}) & , - V'_{12} \\ - V'_{21} & (E'_n - V'_{22}) \end{vmatrix} = 0 \qquad (8.31)$$

التى تسمى بالمعادلة المميزة ، مع العلم أن هذه القيمة جاءت من الميكانيكا الفلكية . وبنفس الطريقة تماما نستطيع تعميم ما سبق عندما تكون الحالات الغامرة أكثر من اثنتين أى $j > 2$. فإذا كانت للمعادلة المميزة السابقة عدة حلول (عددها الأعظمى j) فلا بد أن يقابل كل منها معاملا C_i^0 ، ولهذا فإن حساب التقريب الأول للطاقة يمكن أن يخفض رتبة الغمور أو ينتزعها وذلك باختيار تراكيب خطية معينة للتابع الموجى (8.23) المقابل للتقريب الصفرى .

و) **التقريب الثانى لنظرية الاضطربات ، الهزاز اللاتوافقى** . لندخل قبل كل شيء التصحيح على طاقة جملة فى التقريب الثانى لنظرية الاضطرابات ولنقتصر فى نشر التابع الموجى ψ والطاقة E ، أنظر (8.3) ، على الحدود ذات المرتبة الثانية فى الصغر ثم نعوضها فى معادلة شرودينجر (8.2a) فنجد المعادلة الموافقة للتقريب الثانى ، أى أن :

$$(E_n^0 - H^0)\psi''_n = -(E'_n - V')\psi'_n - E''_n \psi_n^0 \qquad (8.32)$$

فإذا اعتبرنا أن الحل ψ_n^{0*} للمعادلة المتجانسة يجب أن يكون متعامدا مع الطرف الأيمن وأن ψ'_n يعطى بالعبارة (8.22) نجد أن :

$$\int \psi_n^{0*}\psi'_n d^3x = 0,$$
$$E''_n = \int \psi_n^{0*} V' \psi'_n d^3x = \sum_{n'}{}' \frac{|V'_{n'n}|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0} \qquad (8.33)$$

حيث اعتبرنا أن قيمة $V'_{n'n}$ تعطى بالعلاقة (8.15) واستعملنا العلاقة

$$V'_{nn'} = V'^*_{n'n}$$

التى تتحقق عندما يكون المؤثر هرميتيا .

ونلاحظ أن التصحيح (8.33) للتقريب الثانى ، للحالة الأخفض يجب أن يكون سالبا دوما لأن كل السويات الباقية $E_{n'}^0$ تكون أعلى من أى E_n^0 . $E_{n'}^0 > E_n^0$. ولنطبق العلاقة التى حصلنا عليها فى حساب طيف طاقة الهزاز اللا توافقى . فنفرض أن جسيما يقع فى الحفرة الكمونية $V(x)$ ، ولنضع مركز الاحداثيات فى وضع التوازن $V'(x) = 0$ (عندما $x = 0$) ولنأخذ مبدأ الحساب بحيث تنعدم الطاقة عند نقطة التوازن ($V(0) = 0$) وعندئذ ، بنشر الطاقة الكامنة فى سلسلة نجد أن :

$$V(x) = V(0) + xV'(0) + \frac{x^2}{2!}V''(0) + \frac{x^3}{3!}V'''(0) + \frac{x^4}{4!}V^{IV}(0) + \ldots$$

وإذا اعتبرنا أن $V(0) = V'(0) = 0$ وفرضنا (فى حالة التوازن المستقر عند النقطة $x = 0$) أن

$$\frac{1}{2}V''(0) = -\frac{m_0\omega^2}{2!} < 0, \quad \frac{1}{3!}V'''(0) = \alpha$$
$$\frac{1}{4!}V^{IV}(0) = \beta$$

أى أن نحل المسألة لا فى التقريب الصفرى وحده وإنمانحلها بعد أخذ الحدود ذات المرتبة الأعلى بعين الاعتبار ، أى للهزاز اللاتوافقى الذى يطبق فى نظرية الجزيئات وعليه فإن معادلة شرودينجر المقابلة للهزاز اللاتوافقى تكتب بالشكل التالى :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E-\frac{m_0\omega^2x^2}{2}-V'\right)\psi=0 \qquad (8.34)$$

حيث $V' = \alpha x^3 + \beta x^4$ هى طاقة الاضطراب والثابتان α و β لا يتعلقان بـ $\hbar$. ولنحسب طاقة الاضطراب دون اهمال الحدود من المرتبة $\hbar^2$ فبما أن طاقة الهزاز التوافقى فى التقريب الصفرى تكتب بالعلاقة التالية :

$$E_n^0=\hbar\omega(n+{}^1\!/_2) \qquad (8.35)$$

لذا اعتبرنا الطاقة V' كطاقة اضطراب فى التقريب الأول نجد أن :

$$E'_n=V'_{nn}=\alpha(x^3)_{nn}+\beta(x^4)_{nn} \qquad (8.36)$$

ومن السهل البرهان أن :

$$(x^3)_{nn}=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_n|^2x^3\,dx=0$$

لأن المستكمل هو تابع فردى . ويمكن لحساب عنصر المصفوفة $\beta(x^4)$ ، استخدام قاعدة ضرب العناصر المصفوفية ، انظر (7.89) ، وعندئذ نجد أن :

$$(x^4)_{nn}=\sum_\kappa(x^2)_{n\kappa}(x^2)_{\kappa n}=((x^2)_{n,\,n-2})^2+((x^2)_{n,\,n})^2+((x^2)_{n,\,n+2})^2 \qquad (8.37)$$

فإذا لاحظنا بعد ذلك قيم العناصر المصفوفية $x_{n'n}$ ، انظر (7.68) ، فإننا نجد ، طبقا للعلاقة (7.89) ، أن العناصر المصفوفية الثلاثة المختلفة عن الصفر لـ $(x^2)_{nn}$ هى التالية :

$$(x^2)_{n-2,\,n}=\frac{x_0^2}{2}\sqrt{n(n-1)}$$

$$(x^2)_{n+2,\,n}=\frac{x_0^2}{2}\sqrt{(n+2)(n+1)} \qquad (8.38)$$

$$(x^2)_{n,\,n}=x_0^2(n+{}^1\!/_2).$$

وإذا عوضنا ذلك فى المساواة (8.37) نجد لحساب طاقة الاضطراب E'_n فى التقريب الأول الصيغة التالية :

$$E'_n={}^3\!/_2\,\hbar^2\frac{\beta}{m_0^2\omega^2}(n^2+n+{}^1\!/_2) \qquad (8.39)$$

إلا أننا لم ننه حل المسألة بعد ، لأن مساهمة الحد الأول من طاقة الاضطراب αx^3 فى التقريب الثانى متناسبة مع $x_0^6/\hbar \sim \hbar^2$ أما ما يخص مساهمة الحد βx^4 فى التقريب الثانى فتتناسب مع $x_0^8/\hbar \sim \hbar^3$ وبالتالى يمكن أن يهمل فى تقريبنا هذا . وأما التصحيح على الطاقة فى التقريب الثانى لنظرية الاضطرابات فيحسب بالعلاقة (8.33) .

$$E_n'' = \frac{\alpha^2}{\hbar\omega} \sum_{n'} \frac{(x^3)_{nn'}\,(x^3)_{n'n}}{(n-n')}$$

والعناصر المصفوفية التى لا تساوى الصفر هى التالية :

$$(x^3)_{n,\,n-1} = (x^2)_{n,\,n}\,(x)_{n,\,n-1} + (x^2)_{n,\,n-2}\,(x)_{n-2,\,n-1} = 3x_0^3\sqrt{\left(\frac{n}{2}\right)^3}$$
$$(x^3)_{n,\,n-3} = (x^2)_{n,\,n-2}\,(x)_{n-2,\,n-3} = x_0^3\sqrt{\frac{n(n-1)(n-2)}{8}} \qquad (8.40)$$

$$(x^3)_{n,\,n+1} = (x^3)_{n+1,\,n} = 3x_0^3\sqrt{\left(\frac{n+1}{2}\right)^3}$$
$$(x^3)_{n,\,n+3} = (x^3)_{n+3,\,n} = x_0^3\sqrt{\frac{(n+3)(n+2)(n+1)}{8}} \qquad (8.41)$$

حيث

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0\omega}}$$

ومنه نجد أن :

$$E_n'' = -\frac{15}{4}\,\hbar^2\,\frac{\alpha^2}{m_0^3\omega^4}\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right) \qquad (8.42)$$

وتعطى العبارتان (8.39) و (8.42) التصحيح اللاتوافقى لطاقة الهزاز دون اهمال الحدود من المرتبة $\hbar^2$.

ز) **النظرية غير المستقرة للاضطرابات** . لنعتبر أن مؤثر الاضطراب يتعلق بالزمن بشكل صريح $V' = V'(t)$ ، ونطبق نظرية ديراك فى الاضطراب التى تسمح ببناء نظرية العمليات الانتقالية فى معادلة شريدينجر التالية :

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}-\mathrm{H}^{0}-\mathrm{V}'(t)\right)\psi(t)=0 \qquad (8.43)$$

ولنفرض أننا نعرف التوابع الخاصة والقيم الخاصة لمعادلة شرودينجر المستقرة ($V' = 0$) ، أى أن :

$$E_n\psi_n=\mathrm{H}^{0}\psi_n \qquad (8.44)$$

وعندئذ سيكون الحل الكامل للمعادلة غير المضطربة بالشكل التالى :

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}-\mathrm{H}^{0}\right)\psi^{0}(t)=0 \qquad (8.45)$$

كما يمكن تحويله إلى الشكل التالى :

$$\psi^{0}(t)=\sum_{n}C_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n \qquad (8.46)$$

حيث C_n ثوابت اختيارية نصف مربعات قيمها المطلقة تحدد احتمال وجود الجسيم فى الحالة الكوانتية n . وإذا أخذنا بعين الاعتبار طاقة الاضطراب V' فى المعادلة (8.43) فيجب البحث عن حلها العام بالشكل (8.46) (ψ_n و E_n التوابع الخاصة والقيم الخاصة) ولكننا نضع شرطا اضافيا هو أن C_n يجب أن تبتع الزمن ، وهذا ما يقابله رياضيا ، حل المعادلات التفاضلية بطريقة تغيير الثوابت وبما أن العوامل الاحتمالية C_n نفسها تصبح تحت تأثير الاضطراب تابعة للزمن لذا يمكن وصف عملية انتقال الالكترون من حالة كوانتية إلى أخرى . بتبديل الحل (8.46) فى (8.43) وباعتبار أن العوامل C_n تتعلق بالزمن والمعادلة (8.44) صحيحة نحصل على المعادلة التالية :

$$-\sum_{n''}\frac{\hbar}{i}\dot{C}_{n''}\psi_{n''}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n''}t}=\sum_{n''}\mathrm{V}'(t)\,C_{n''}\psi_{n''}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n''}t} \qquad (8.47)$$

ولنضرب طرفى المساواة بـ $\psi^{*}_{n'}e^{\frac{i}{\hbar}E_{n'}t}d^{3}x$ وباجراء عملية التكامل فى الفراغ كله بعد الأخذ بعين الاعتبار شرط التعامد والمعايرة

$$\int\psi^{*}_{n'}\psi_{n''}d^{3}x=\delta_{n'n''} \qquad (8.48)$$

نحصل لحساب العوامل $C_{n'}$ على جملة المعادلات التالية :

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{C}_{n'}=\sum_{n''}C_{n''}e^{it\omega_{n'n''}}V'_{n'n''}(t) \qquad (8.49)$$

حيث يكون التردد

$$\omega_{n'n''}=\frac{E_{n'}-E_{n''}}{\hbar} \qquad (8.50)$$

والعنصر المصفوفى

$$V'_{n'n''}(t)=\int\psi^*_{n'}V'(t)\,\psi_{n''}d^3x \qquad (8.51)$$

ولنلاحظ أن جملة المعادلات (8.49) دقيقة ، أى أنها مكافئة تماما لمعادلة البدء (8.43) ، إلا أن حلها الدقيق فى الحالة العامة غير جائز . أما تقريب نظرية الاضطرابات هنا فيكمن بالبحث عن الحل بالنشر التالى :

$$C_{n'}=C^0_{n'}+C'_{n'}+C''_{n'}+\ \ldots \qquad (8.52)$$

علما أن عوامل التقريب الصفرى $C^0_{n'}$ مستقلة عن V' أما عوامل التقريب الأول $C'_{n'}$ والتقريب الثانى $C''_{n'}$ فيجب أن تتناسب مع V' و $(V'')^2$.
وبتعويض (8.52) فى (8.49) والاقتصار على حدود التقريبين الصفرى والأول فنجد لحساب $C'_{n'}$ جملة المعادلات التالية :

$$\dot{C}^0_{n'}=0 \qquad \text{(التقريب الصفرى)}$$

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{C}'_{n'}=\sum_{n''}C^0_{n''}e^{it\omega_{n'n''}}V'_{n'n''}(t) \qquad \text{(التقريب الأول)} \qquad (8.53)$$

وهكذا . . .

وتبين المعادلة الأولى من (8.53) أنه يجب أن لا تتعلق العوامل المجهولة بالزمن ضمن التقريب الصفرى أى :

$$C^0_{n'}=\text{const} \qquad (8.54)$$

وتحدد قيم هذه العوامل بالشروط الابتدائية التى تصف الالكترون قبل أن يتعرض للاضطراب . ولنفرض مثلا أن الالكترون كان فى الحالة n فى اللحظة الابتدائية أى ($t=0$) وعندئذ نستطيع أن نكتب

$$C^0_{n''} = \delta_{nn''} \qquad (8.55)$$

وتحدد هذه العلاقة الشروط الابتدائية لمسألتنا إذ نجد بعد تبديل (8.55) فى (8.53) واعتبار $(n' \neq n)$ أن :

$$C'_{n'} = C_{n'}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt e^{it\omega_{n'n}} V'_{n'n}(t) \qquad (8.56)$$

وعادة ما يحسب احتمال الانتقال w ، فى الميكانيكا الكوانتية فى وحدة الزمن ، فإذا اعتبرنا أن احتمال وجود الالكترون فى الحالة n' يساوى مربع القيمة المطلقة $|C_{n'}|^2$ نحصل لحساب الانتقال $n \to n'$ فى وحدة الزمن على العبارة التالية :

$$w_{nn'} = \frac{\partial}{\partial t}|C_{n'}|^2 \qquad (8.57)$$

وتعتبر العلاقتان (8.57) و (8.56) أساسا لدراسة مسائل كثيرة فى الميكانيكا الكوانتية بالتقريب الأول لنظرية الاضطرابات غير المستقرة التى يمكن بواسطتهما بناء نظرية الاشعاع الكوانتية .

البند ٩ ـ نظرية الاشـعاع الكوانتية

أ) الانتقالات التلقائية والقسرية . طبقا للالكتروديناميكا (التحريك الكهربائى) الكلاسيكية يمكن أن تكون الشحنات المتسارعة مصدرًا لاشعاع تحدد طاقته الضوئية فى وحدة الزمن بالعلاقة التالية* :

$$W^{cl} = \frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\overline{\ddot{r}^2} \qquad (9.1)$$

حيث $\ddot{r}$ ـ تسارع الجسيم . فإذا كان مصدر الاشعاع هزازا توافقيا آحادى البعد ، أى أن :

---

* يعنى الخط الصغير فى أعلى الحرف على أنه المتوسط بالنسبة للزمن .

$$x = a \cos \omega t \qquad (9.2)$$

فإن تردد الاشعاع سيتطابق مع التردد الميكانيكى لذبذبة الهزاز أما شدة الاشعاع فتتناسب مع مربع السعة a^2 ، انظر (7.5) ، وعندما تكون حركة الشحنة معطاة بقانون دورى معقد $x = f(t)$ دوره $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$ ، يمكن نشر التابع $f(t)$ فى سلسلة فورييه (فورير) :

$$x = \sum_{\kappa} a_{\kappa} \cos \omega \kappa t \qquad (9.2a)$$

ثم دراسة الاشعاع كأنه ناتج من مجموعة هزازات تردداتها $\omega_\kappa = \kappa\omega$ حيث $k = 1, 2, 3, \ldots$ ، وبحيث يشع لا النغم الأساسى $(\kappa = 1)$ ω وحده وإنما الأنغام الباقية $k\,\omega$ $(k = 2, 3, 4, \ldots)$ أيضا ، أما شدة الاشعاع المقابلة فتتناسب مع a_k^2 . وهكذا نرى أنه طبقا للنظرية الكلاسيكية يتعين اشعاع الجملة تماما بمعرفة خواصها الميكانيكية ، فتردد اشعاع الجملة يساوى تردد اهتزاز الجملة الميكانيكى أو أضعافه ، أما شدة الاشعاع المقابلة للنغمات الأعلى فتتناسب مع a_k^2 . ولكن الأمر يختلف فى الميكانيكا الكوانتية ، لأن الاشعاع نفسه لا يحدث إلا بانتقال الجسيم (أو الجملة) من حالة كوانتية إلى أخرى أصغر طاقة أو كما يقال ’’ من أعلى إلى أسفل ‘‘ .

لقد كان أينشتين أول من درس مسألة الاشعاع الكوانتية سنة ١٩١٧ حيث أدخل المعاملين A و B (اللذين يسميان معاملى اينشتين) وهما يميزان انتقالات الجملة التلقائية والقسرية (التى تحدث بتأثير حقل كهرطيسى خارجى من سوية طاقة إلى أخرى) . وتتلخص المبادىء الرئيسية لنظرية الاشعاع الكوانتية فى أنه إذا كان أحد الكترونات جملة ذرية يقع فى سوية متهيجة n طاقتها E_n فإنه يوجد احتمال معين $A_{nn'}$ منسوب إلى وحدة الزمن لانتقال هذا الالكترون إلى سوية طاقة n' طاقتها $E_{n'}$ ، بحيث ينطلق فوتون طاقته $\hbar\omega = E_n - E_{n'}$ وإذا كان عدد الذرات المتشابهة هو N_n

فيمكن كتابة طاقة الاشعاع فى وحدة الزمن الناتجة عن الانتقالات التلقائية بالشكل :

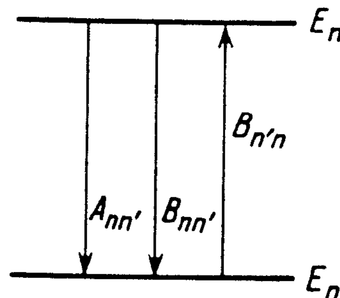
$$W^{\text{u}}_{\text{rad}} = N_n A_{nn'} \hbar\omega \tag{9.3}$$

وإذا تعرضت الذرات إلى إشعاع مغناطيسى خارجى فلا بد لهذا الأخير من اثارة ما يسمى الانتقالات القسرية من أعلى إلى أسفل وبالعكس ، مع العلم ان الانتقالات من أسفل إلى أعلى ستحصل بعد امتصاص معين للفوتونات .

ولنرمز ، كما فعل أينشتين ، لاحتمال الانتقال القسرى من السوية n إلى السوية n' بالرمز $B_{nn'}$ ومن السوية n' إلى السوية n بالرمز $B_{n'n}$ وعند اعتبار أن عدد الانتقالات القسرية يتناسب مع الشدة الطيفية $\rho(\omega)$ للاشعاع الوارد ، نجد العلاقتين اللتين تحددان طاقتى الاشعاع والامتصاص الناتجين من الانتقالات القسرية ، أى أن :

$$\begin{aligned} W^{\text{ind}}_{\text{rad}} &= N_n B_{nn'} \rho\hbar\omega, \\ W^{\text{ind}}_{\text{abs}} &= N_{n'} B_{n'n} \rho\hbar\omega. \end{aligned} \tag{9.4}$$

حيث $N_{n'}$ - عدد الذرات الموجودة فى الحالة الكوانتية n' . وعليه ، ندرس الحالة عندما يحصل التوازن الترموديناميكى بين الذرات المسخنة والضوء الصادر عنها (الاشعاع الأسود) أى عندما يكون عدد الانتقالات المباشرة



الشكل ٩ ـ ١ . الانتقالات المباشرة (من أعلى إلى أسفل) هى انتقالات تلقائية وقسرية ، والعكسية (من أسفل إلى أعلى) هى انتقالات قسرية فقط .

والعكسية متساويا ، انظر الشكل ٩ ـ ١ ، أى أن

$$N_n A_{nn'} + N_n \rho B_{nn'} = N_{n'} \rho B_{n'n} \qquad (9.5)$$

فإذا اعتبرنا أن احتمال طاقة الالكترونات فى هذه الحالة يعطى بتوزيع ماكسويل ـ بولسمان ، أى أن :

$$N_n = Ce^{-E_n/k_B T}, \quad N_{n'} = Ce^{-E_{n'}/k_B T}$$

نجد أن :

$$A_{nn'} e^{-E_n/k_B T} + \rho B_{nn'} e^{-E_n/k_B T} = \rho B_{n'n} e^{-E_{n'}/k_B T}$$

فإذا اختصرنا $e^{-E_n/k_B T}$ من طرفى المعادلة واعتبرنا $E_n - E_{n'} = \hbar\omega$ نجد أن

$$\rho(\omega) = \frac{\dfrac{A_{nn'}}{B_{nn'}}}{\dfrac{B_{n'n}}{B_{nn'}} e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \qquad (9.6)$$

أما معامل الاشعاع التلقائى A_{nn} فيمكن استخلاصه من مبدأ التقابل بمقارنة العلاقات الكوانتية بما يقابلها من النظرية الكلاسيكية . لنجرى هذه المقارنة على مثال الهزاز التوافقى ، فطبقا للنظرية الكلاسيكية تعطى الطاقة التى يشعها الهزاز التوافقى فى وحدة الزمن بالعلاقة (7.10) ، أى أن :

$$W^{cl} = \frac{2e^2\omega^2 E}{3m_0 c^3} \qquad (9.7)$$

أما فى النظرية الكوانتية فتعين بالعلاقة (9.3) التى تكتب فى حالة وجود هزاز واحد ($N_n = 1$) بالشكل التالى :

$$W^{cl} = \hbar\omega_{nn'} A_{nn'} \qquad (9.7a)$$

وإذا فرضنا أن معامل الاشعاع التلقائى متناسب مع مربع العنصر المصفوفى*

* أى انطلاقا من التشابه مع النظرية الكلاسيكية يكون الاشعاع متناسبا مع مربع سعة الاهتزاز ، أنظر (7.5) .

$$A_{nn'} = C\,|\,x_{n'n}\,|^2$$

وعند الانتقال من أعلى إلى أسفل $(n \to n')$ فإن العناصر المصفوفية التى تختلف عن الصفر ، انظر (7.68) ، ستكون التالية :

$$x^2_{n-1,\,n} = \frac{\hbar n}{2m_0\omega} = \frac{1}{2m_0\omega^2}\,|E_n - E_0|$$

بالاضافة إلى أن :

$$\omega_{n,\,n-1} = \frac{E_n - E_{n-1}}{\hbar} = \omega$$

وبمساواة التقريب الكلاسيكى $(\hbar \to 0)$ لعبارة طاقة الاشعاع الكوانتية* (9.7a) بالعبارة الكلاسيكية المقابلة (9.7) ، نجد لحساب الثابت المعادلة التالية :

$$\frac{CE\hbar\omega}{2m_0\omega^2} = \frac{2}{3}\,\frac{\omega^2 E e^2}{m_0 c^3}$$

وبحساب الثابت C نستخلص قيمة عامل الاشعاع القسرى**

$$A_{nn'} = \frac{4}{3}\,\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}\,|\,r_{n'n}\,|^2 \qquad (9.8)$$

وبأخذ علاقة بلانك المعروفة ، انظر (1.14) ، بعين الاعتبار نكتب

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}\,\frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

وبتعويضها فى (9.6) نستطيع أن نكتب معامل أينشتين للانتقالات القسرية :

• وهذا يقودنا رياضيا إلى حذف الطاقة الصفرية $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ التى رتبتها $1/n$ فى التقريب الكلاسيكى أى فى مجال الأعداد الكوانتية الكبيرة $(n >> 1)$ بالنسبة لمقدار $E_n - E_0$.

•• لقد انتقلنا هنا من الحالة أحادية البعد إلى الحالة ثلاثية الأبعاد وذلك بتغيير العنصر المصفوفى $|\,x_{n'n}\,|^2$ بعنصر مصفوفى شعاعى أى أن :

$$|\,r_{n'n}\,|^2 = |\,x_{n'n}\,|^2 + |\,y_{n'n}\,|^2 + |\,z_{n'n}\,|^2$$

$$B_{nn'} = B_{n'n} = \frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3} A_{nn'} = \frac{4}{3} \frac{\pi^2 e^2}{\hbar^2} | r_{n'n} |^2 \qquad (9.8a)$$

وطبقا لـ (9.7a) تكتب طاقة الاشعاع بالشكل التالى :

$$W_{nn'} = \frac{4}{3} \frac{e^2\omega^4}{c^3} | r_{n'n} |^2 \qquad (9.8b)$$

وبالرغم من أن هذه الطريقة تعطى نتائج كوانتية لما يسمى باشعاع ثنائى الأقطاب ، فلا يمكن اعتبارها منطقية (وهذا ينطبق أيضا على الاستنتاج الأول لعلاقة بلانك ، انظر البند ١ ، إلا أنها كافية عند الاقتصار على التصورات البسيطة أى أثناء قراءة هذا الكتاب للمرة الأولى) . أما إذا أردنا ثطبيق نظرية الاشعاع الكوانتية السابقة فلا بد أولا من حساب معاملى أينشتين A و B ومن ثم بتعويضهما فى (9.6) نحصل على الأساس الكوانتى الدقيق لعلاقة بلانك . هذا ما سنفعله فيما يبقى من هذا البند ، أما الآن فسنقتصر على بعض الملاحظات العامة عن النظرية الكوانتية للاشعاع . تتلخص الخطوط العامة للنظرية الكوانتية للاشعاع فى أنه يمكن فى إطار نظرية شرودينجر فهم الانتقالات القسرية التى تحدث نتيجة للتفاعل بين الكترونات الذرة والموجة الكهرطيسية الخارجية ، لكننا لا نستطيع فهم الانتقالات التلقائية من سويات الطاقة المتهيجة إلى السويات الأخفض فى حالة انعدام التأثير الخارجى الذى يسبب مثل هذه الانتقالات . ولم تحل هذه المشكلة إلا بعد انشاء نظرية الاشعاع الكوانتية التى استخدم فيها تكميم الحقل الكهرطيسى (التكميم الثانى) والتى تعتبر الالكترونات وحقل الاشعاع بمثابة جملتين كوانتيتين تتبادلان التأثير (تتفاعلان) ، ولا ينعدم هذا التفاعل حتى فى غياب الفوتونات الحقيقية ، فيما تسمى الفوتونات الغائبة فى هذه اللحظة والتى قد تظهر فيما بعد بالفوتونات الافتراضية التى تشكل ما يسمى بالفراغ الكهرطيسى . وما يشبه التفاعل شبه الكلاسيكى بين الالكترونات والفوتونات الافتراضية هو تأثير قوى الاحتكاك الاشعاعى (قوة بلانك) على الالكترون المتحرك ، أى أن :

$$F^{\text{Plank}} = \frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\dddot{x}$$

وهى القوة التى يسببها الحقل المغناطيسى الناتج عن الالكترون نفسه ، هذا الحقل الذى يمكن أن ينشأ عن الالكترون بشكل اشعاع ضوئى يقابل انتقال الفوتونات من الحالة الافتراضية إلى الحالة الحقيقية ، كما يقال فى التكميم الثانى . وقبل البدء فى بناء النظرية الكوانتية للاشعاع سنتوقف عند بعض المسائل المتعلقة بتكميم الحقل الكهرطيسى الحر .

ب) **تكميم الحقل الكهرطيسى الحر** . من المعلوم أنه يمكن وصف حقل الفوتونات (الأمواج الكهرطيسية العرضانية) بواسطة كمون شعاعى يحقق معادلة دالمبير

$$\nabla^2 A - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = 0. \qquad (9.9)$$

لنبحث عن حل المعادلة (9.9) بشكل سلسلة فورييه التالية :

$$A = \frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\varkappa} A(\varkappa, t)\, e^{i\varkappa r} \qquad (9.10)$$

بعد افتراض أن التابع الموجى يحقق شرط الدورية التالى :

$$e^{i\varkappa(r+L)} = e^{i\varkappa r}$$

بالاضافة إلى أن

$$L_x = L_y = L_z = L$$

انظر أيضا (4.41) ، عندئذ نجد مركبات المتجه (الشعاع) الموجى $\varkappa$ التالية :

$$\varkappa_x = n_1\frac{2\pi}{L}, \quad \varkappa_y = n_2\frac{2\pi}{L}, \quad \varkappa_z = n_3\frac{2\pi}{L} \qquad (9.11)$$

حيث

$$n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$$

وإذا عوضنا (9.11) فى (9.9) ولاحظنا أن :

$$\nabla^2 e^{i\varkappa r} = -\varkappa^2 e^{i\varkappa r}$$

نرى أن السعة $A(\varkappa, t)$ تحقق نفس المعادلة التى يحققها الهزاز التوافقى أيضا :

$$\ddot{A}(\varkappa, t) + c^2\varkappa^2 A(\varkappa, t) = 0 \qquad (9.12)$$

والتى حلها بالشكل التالى :

$$A(\varkappa, t) = A(\varkappa)\, e^{-ic\varkappa t} + B(\varkappa)\, e^{ic\varkappa t} \qquad (9.13)$$

وحتى يكون متجه الكمون حقيقيا يجب أن نجعل

$$B(\varkappa) = A^{*}(-\varkappa) \qquad (9.14)$$

ومن السهل البرهان على العلاقة الأخيرة إذا عوضنا (9.13) فى (9.10) وأجرينا ، فى المجموع المؤلف من العوامل $B(\varkappa)$ التغيير التالى :

$$\varkappa \to -\varkappa$$

وإذا أخذنا بنظر الاعتبار أيضا (9.14) سنستطيع كتابة النشر (9.10) بالشكل التالى :

$$A = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\varkappa} \left(A(\varkappa)\, e^{-ic\varkappa t + i\varkappa r} + A^{*}(\varkappa)\, e^{ic\varkappa t - i\varkappa r} \right) \qquad (9.15)$$

وبما أن المجموع الأخير يمثل مجموع مقدارين مترافقين عقديا لذا لا بد وأن يكون حقيقيا . ولنحسب بعد ذلك الطاقة الكلية H لحقل الفوتونات التي تساوى كما نعلم

$$H = \frac{1}{8\pi} \int (\mathscr{E}^2 + \mathscr{H}^2)\, d^3x \qquad (9.16)$$

مع العلم أنه عندما يتعلق الأمر بالأمواج العرضانية الكهرطيسية وحدها حيث

$$\Phi = 0, \qquad \operatorname{div} A = 0 \qquad (9.17)$$

يكون لدينا

$$\mathscr{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial A}{\partial t}, \quad \mathscr{H} = \mathrm{rot}\, A \qquad (9.18)$$

ملاحظة : بصورة عامة ، عندما يكون الحقل الكهرطيسى متغيرا مع الزمن نجد أن الكمون الشعاعى A' يختلف عن الصفر بالاضافة إلى الكمون السلمى (العددى) Φ' ولكننا نستطيع أن نجرى دائما فى الفراغ التحويلات المعيارية

$$\Phi = \Phi' + \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t}, \quad A = A' - \mathrm{grad}\, f$$

التى لا تتغير أثناء ربط شدة متجه الحقل الكهربائى

$$\mathscr{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial A}{\partial t} - \mathrm{grad}\,\Phi$$

بشدة متجه الحقل المغناطيسى

$$\mathscr{H} = \mathrm{rot}\, A$$

وعند التبديل فى أى من الكمونات Φ ، Φ' ، A ، A' ، كما أن شرط لورنتز $\left(\mathrm{div}\, A + \frac{1}{c}\frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0\right)$ لا يتغير أيضا إذا حقق التابع المعيارى f معادلة دالمبير

$$\nabla^2 f - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = 0$$

وبما أن كل مركبات الكمونات فى الفراغ يجب أن تحقق أيضا معادلة دالمبير فإنه يمكن أن نجعل حتى فى الحالة العامة $\frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t} = -\Phi'$ وهذا يؤدى آليا إلى (9.17) والعلاقة (9.18) .

وإذا عوضنا النشر (9.18) فى (9.16) وأخذنا بعين الاعتبار العلاقة :

$$\frac{1}{L^3}\int d^3x e^{i(\varkappa+\varkappa')r} =$$
$$= \frac{1}{L}\int dx\, e^{\frac{2\pi i x}{L}(n_1+n_1')}\frac{1}{L}\int dy\, e^{\frac{2\pi i y}{L}(n_2+n_2')}\frac{1}{L}\int dz\, e^{\frac{2\pi i z}{L}(n_3+n_3')} =$$
$$= \delta_{n_1,-n_1'}\cdot\delta_{n_2,-n_2'}\cdot\delta_{n_3,-n_3'} = \delta_{\varkappa,-\varkappa'} \qquad (9.19)$$

وكذلك العلاقة (9.15) نستخلص الهاملتونيان التالى :

$$H=\frac{1}{8\pi}\sum_{\varkappa}\left\{\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial \boldsymbol{A}(\varkappa,t)}{\partial t}\frac{\partial \boldsymbol{A}(-\varkappa,t)}{\partial t}\right)+([\varkappa \boldsymbol{A}(\varkappa,t)][\varkappa \boldsymbol{A}(-\varkappa,t)])\right\} \tag{9.20}$$

كما أنه طبقا لـ (9.14) يمكن كتابة (9.13) بالشكل التالى :

$$\boldsymbol{A}(\varkappa,t)=\boldsymbol{A}(\varkappa)e^{-ic\varkappa t}+\boldsymbol{A}^*(-\varkappa)e^{ic\varkappa t} \qquad (9.21)$$

ومن الضرورى عند حساب الهاملتونيان الأخذ بعين الاعتبار علاقة المشتقة التالية :

$$\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}(\varkappa,t)}{\partial t}=-i\varkappa[\boldsymbol{A}(\varkappa)e^{-ic\varkappa t}-\boldsymbol{A}^*(-\varkappa)e^{ic\varkappa t}] \qquad (9.22)$$

وكذلك شروط عرضانية حقل الفوتونات التى تنتج من (9.17) أى أن

$$(\varkappa \boldsymbol{A}(\varkappa))=(\varkappa \boldsymbol{A}^*(\varkappa))=0 \qquad (9.23)$$

وبتعويض العلاقة الأخيرة فى (9.20) يمكن أن نبرهن أن الهاملتونيان لا يتعلق بالزمن وأنه يساوى

$$H=\frac{1}{4\pi}\sum_{\varkappa}\sum_{s=1,2,3}\varkappa^2[A_s^*(\varkappa)A_s(\varkappa)+A_s(\varkappa)A_s^*(\varkappa)] \qquad (9.24)$$

مع العلم أننا أجرينا التغيير $\varkappa \rightarrow -\varkappa$ فى الطرف الأيمن من المساواة (9.24) ، هذا وينتج من (9.23) أنه من المستحيل اعتبار المركبات الثلاث لمتجه (لشعاع) الكمون مستقلة بينما يمكن اختيار مركبتين مستقلتين فقط ، ويعود سبب ذلك إلى وجود امكانيتى استقطاب للفوتون فقط . أى أن نشر سعة الكمونات فى مجالات الاستقطاب لا يكون وحيد القيمة ، إلا أنه بالرغم من ذلك يجب أن لا تتوقف النتيجة النهائية على عملية التوسيط أو الجمع فى هذه الحالات ، ولهذا يعبر عن مركبات متجه الكمون بواسطة مركبتين مستقلتين بحيث تتحقق شروط الدورية آليا وتحافظ الصيغة التربيعية

للهاملتونيان عند التعبير عنه بالمركبتين المستقلتين على شكلها . ولهذا نفرض أن :

$$A_x(\varkappa) = \sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{\varkappa}}\, a_1 = \sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{\varkappa}} \left(\frac{\varkappa_z \varkappa_x}{\varkappa \varkappa_{12}} b_1 - \frac{\varkappa_y}{\varkappa_{12}} b_2 \right)$$

$$A_y(\varkappa) = \sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{\varkappa}}\, a_2 = \sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{\varkappa}} \left(\frac{\varkappa_z \varkappa_y}{\varkappa \varkappa_{12}} b_1 + \frac{\varkappa_x}{\varkappa_{12}} b_2 \right) \quad (9.25)$$

$$A_z(\varkappa) = \sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{\varkappa}}\, a_3 = -\sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{\varkappa}} \frac{\varkappa_{12}}{\varkappa} b_1,$$

حيث

$$\varkappa_{12} = \sqrt{\varkappa_x^2 + \varkappa_y^2}$$

$$\varkappa = \sqrt{\varkappa_{12}^2 + \varkappa_z^2} = \sqrt{\varkappa_x^2 + \varkappa_y^2 + \varkappa_z^2} \quad (9.26)$$

ولن نكتب تبعية السعتين b_1 و b_2 للمتجه $\varkappa$ ، توخيا للاختصار* ، أى $b_1 = b_1(\varkappa)$ و

$$b_1(t) = b_1 e^{-ic\varkappa t}$$

$$b_1^+(t) = b_1^+ e^{ic\varkappa t} \quad (9.27)$$

كما سنستخدم الرمز

$$b_1' = b_1(\varkappa')$$

لقد ادخل معامل المعايرة $\sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{\varkappa}}$ لكى تكون قواعد التبديل ، انظر (9.32) ، معايرة على الواحد . وإذا عوضنا (9.25) فى عبارة الهاملتونيان (9.24) نجد أن

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mu'=1,2} \sum_{\varkappa'} c\hbar\varkappa' \left(b_{\mu'}'^{+} b_{\mu'}' + b_{\mu'}' b_{\mu'}'^{+} \right) \quad (9.28)$$

وإذا اعتبرنا المعادلةالموجية لنتيجة للتكميم الأول (بعبارة أدق، تخص هذه

* سنضع السعات b بشكل مصفوفات ولهذا لن تكون السعات المرافقة مقترنة عقديا وإنما ستكون مقادير هيرميتية مترافقة ، لذا سنرمز لها بالرمز b^+ .

الملاحظة معادلة شرودينجر لا معادلة ماكسويل) فيمكن وصف الخواص الموجية كنتيجة للتكميم الأول ، حيث تكون السعات الثابتة b_μ اعدادا (الأعداد - c) أى أنها أعداد تبادلية فيما بينها . ويمكن اضافة فرضية جديدة هى أن مربع السعة يصف عدد الجسيمات ، لكن هذا العدد يجب أن لا يتغير مع الزمن فى عمليتى الاشعاع والامتصاص لأن العدد الكلى للجسيمات ثابت ، ولهذا يجب انشاء نظرية تأخذ بعين الاعتبار دراسة مثل هذه العمليات ، وذلك باعتبار b مؤثرات (الأعداد - q) ، ويتم ذلك رياضيا بتكميم العلاقة (9.28) مع تسمية هذا التكميم بالتكميم الثانى ، وتعتبر معادلة الحركة الكوانتية ، انظر (6.45) ، أساسا للتكميم الثانى كما ويمكن اجراء التكميم الأول بواسطتها أيضا ، فإذا لاحظنا تبعية السعة للزمن ، انظر (9.27) فيمكن أن نكتب :

$$-ic\varkappa b_\mu = \frac{i}{\hbar}(Hb_\mu - b_\mu H) \qquad (9.29)$$

وبصورة مماثلة يمكن البرهان على أن :

$$ic\varkappa b_\mu^+ = \frac{i}{\hbar}(Hb_\mu^+ - b_\mu^+ H) \qquad (9.30)$$

وإذا عوضنا الهاملتونيان (9.28) هنا نجد أن العلاقة (9.29) تأخذ الشكل التالى :

$$-c\varkappa b_\mu = \sum_{\mu'=1,2}\sum_{\varkappa'}\frac{c\varkappa'}{2}\left[b_{\mu'}'^{+}(b_{\mu'}'b_\mu - b_\mu b_{\mu'}') + (b_{\mu'}'^{+}b_\mu - b_\mu b_{\mu'}'^{+})b_{\mu'}' + \right.$$
$$\left. + b_{\mu'}'(b_{\mu'}'^{+}b_\mu - b_\mu b_{\mu'}'^{+}) + (b_{\mu'}'b_\mu - b_\mu b_{\mu'}')b_{\mu'}'^{+}\right] \qquad (9.31)$$

وتتحقق المساواة الأخيرة إذا عوضنا :

$$[b_\mu, b_{\mu'}'^{+}] = b_\mu b_{\mu'}'^{+} - b_{\mu'}'^{+} b_\mu = \delta_{\mu\mu'}\delta_{\varkappa\varkappa'} \qquad (9.32)$$

$$[b_\mu, b_{\mu'}'] = b_\mu b_{\mu'}' - b_{\mu'}' b_\mu = 0 \qquad (9.33)$$

ومن (9.30) ينتج أيضا أن

$$[b_\mu^+, b_\mu'^+] = 0 \qquad (9.34)$$

والمعادلة الأخيرة تكافىء التكميم الثانى لسعة الحقل الكهرطيسى .

ملاحظة : ان العلاقتين (9.32) و (9.34) تقابلان الهاملتونيان (9.28) وتصفان التكميم الثانى للجسيمات التى تخضع لاحصاءات بوزى ـ اينشتين . أما إذا كان الهاملتونيان من الشكل

$$H = \frac{1}{2}\sum_{x'} c\hbar x' (C'^+C' - C'C'^+) \qquad (9.35)$$

وهو ما يمثل الجسيمات التى تخضع لمعادلة ديراك ، انظر البند ١٨ ، فإن معادلة الحركة الكوانتية ستخضع إلى ما يسمى بعلاقات فيرمى ـ ديراك التبادلية

$$\begin{aligned} C'^+C + CC'^+ &= \delta_{xx'} \\ C'C + CC' = C'^+C^+ + C^+C'^+ &= 0 \end{aligned} \qquad (9.36)$$

وينتج من (9.32) ان السعات اللا تبادلية هى تلك التى تقابل قيمة وحيدة لكل من الاندفاع والاستقطاب* :

$$b_\mu b_\mu^+ - b_\mu^+ b_\mu = 1 \qquad (9.37)$$

ولهذا لا يمكن للسعات b_μ أن تكون أعدادا ـ c عادية بل تكون أعدادا ـ q أى مؤثرات (وهذا ما يشبه المؤثرات p_x و x فى التكميم الأول للمعادلة) تتحقق المساواة (9.37) إذا اعتبرنا أن المؤثرين b و b^+ يساويان المصفوفتين اللانهائيتين المترافقتين هرميتيا** ، أى أن :

---

* لو لم ندخل معامل المعايرة $\sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{x}}$ فى المساواة (9.25) لوجدنا فى الطرف الأيمن من (9.37) مربع هذا المعامل .

** سنهمل دليل الاستقطاب μ عند السعة b ، توخيا للتبسيط ، مع ملاحظة أننا رأينا نفس المصفوفتين (9.38) ، (9.39) سابقا ، عند دراستنا للهزاز التوافقى ، انظر (7.123) .

$$b=\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \qquad (9.38)$$

$$b^{+}=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \qquad (9.39)$$

ومنه ينتج

$$bb^{+}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \qquad (9.40)$$

$$b^{+}b=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \qquad (9.41)$$

أو

$$bb^{+}-b^{+}b=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \qquad (9.42)$$

ان هذه القيم المصفوفية للسعتين b و b^{+} تحقق المساواة (9.37) . وان التكميم الثانى للحقل الكهرطيسى يؤول من الناحية الفيزيائية إلى وصف الجملة الكوانتية المتغيرة الفوتونات ، أو وصف اصدار وامتصاص الفوتونات اعتمادا على بنيتها الجسيمية ، ولكى تتحقق العلاقة الأخيرة نختار التابع $f(N)$ (حيث N ـ عدد الفوتونات) الذى يؤثر على كل من المصفوفتين b و b^{+} بالشكل التالى* :

---

* يجب أن تؤثر كل سعة متعلقة بالقيمتين μ و $\varkappa$ على مصفوفتها بالنسبة لعدد الجسيمات $f(N)$ ، فيما يكون التابع العام لعدد الجسيمات مساويا إلى جداء المصفوفات كلها ، أى أن :

$$f(N, N', N'' \dots) = f(N) f(N') f(N'') \dots$$

$$f(0)=\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\\ \cdot\\ \cdot\\ \cdot\end{bmatrix},\quad f(1)=\begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\\ \cdot\\ \cdot\\ \cdot\end{bmatrix},\quad f(2)=\begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\\ \cdot\\ \cdot\\ \cdot\end{bmatrix} \qquad (9.43)$$

حيث يمثل التابع $f(0)$ الحالة الخالية من الفوتونات أما التابع $f(1)$ فيقابل حالة وجود فوتون واحد و $f(2)$ - فوتونان وهكذا دواليك . وإذا أخذنا بعين الاعتبار المصفوفتين (9.38) و (9.39) فمن السهل البرهان على أن :

$$bf(0)=0,\quad bf(1)=f(0),\quad bf(2)=\sqrt{2}\,f(1)$$

أو

$$bf(N)=\sqrt{N}\,f(N-1)$$

وبنفس الطريقة تماما يتعين تأثير السعات المرافقة أى أن :

$$b^{+}f(0)=f(1),\quad b^{+}f(1)=\sqrt{2}\,f(2),\ \dots$$
$$\dots,\quad b^{+}f(N)=\sqrt{N+1}\,f(N+1) \qquad (9.44)$$

حيث يسمى المؤثر b بمؤثر الامتصاص (الفناء) لـ ($N-N-1$) من الفوتونـات أمـا المؤثـر b^{+} فيسمـى بمؤثـر الاصدار (التوليـد) لـ ($N-N+1$) من الفوتونات . وعليه ينتج من المساواة الأخيرة أن :

$$\begin{aligned} b^{+}bf(N)&=Nf(N)\\ bb^{+}f(N)&=(N+1)f(N)\end{aligned} \qquad (9.45)$$

أى أن القيم الخاصة المقابلة للمؤثرين $b^{+}b$ و $b\,b^{+}$ عند تأثيرهما على التابع $f(N)$ تساوى إما عدد الفوتونـات N (بالنسبـة للمؤثـر $b^{+}b$) أو $N+1$ (بالنسبة $b\,b^{+}$) . ونرى من العلاقتين (9.45) ، أنه قد يتواجد

أى عدد من الجسيمات فى أى حالة كوانتية ، ولهذا فإن العلاقات التبادلية (9.37) تؤدى إلى احصائيات بوزى - اينشتين .

ملاحظة : لكى تتحقق العلاقات التبادلية (9.36) التى تنتج منها ان ما يختلف عن الصفر هو التركيب اللاتبادلى التالى :

$$C^{+} C + C C^{+} = 1 \qquad (9.46)$$

ولكى تتحقق (9.36) يجب أن نختار عوضا عن المصفوفات (9.38) و (9.39) و (9.43) المصفوفات التالية :

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C^{+} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$
$$f(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad f(1) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (9.47)$$

وعندئذ تتحقق العلاقات التبادلية (9.46) مباشرة ونجد أن :

$$Cf(0) = 0, \qquad Cf(1) = f(0)$$
$$C^{+}f(0) = f(1), \qquad C^{+}f(1) = 0$$

ومنه ، نرى أن C^{+} هو مؤثر الاصدار (التوليد) و C مؤثر الفناء ، علما أن هذه الحالة تختلف عن احصاءات بوزى - اينشتين ، إذ لا يمكن أن يتواجد فى كل حالة كوانتية أكثر من جسيم واحد (احصائيات فيرمى - ديراك) ، أى أنه يتعين تأثير مربعات السعات على تابع العدد بشكل مختلف عن (9.45) أى أن :

$$C^{+}Cf(N) = Nf(N), \qquad CC^{+}f(N) = (1 - N)f(N) \qquad (9.48)$$

وإذا لم تتواجد اية فوتونات فى اللحظة الابتدائية ($N = 0$) فإن $b^{+}b = 0$ و $b\,b^{+} = 1$ ، وتدل العلاقة الأخيرة أن الجملة الكوانتية (الذرة مثلا) يجب أن تتبادل التأثير مع حقل الفوتونات المكمم ثانية (أو كما يقال أحيانا الفراغ الكهرطيسى) حتى فى غياب الفوتونات الحقيقية ($N = 0$) وبمعرفة

العلاقات التبادلية للسعات $b_\varkappa$ يمكن بملاحظة (9.25) أن نحسب العلاقات التبادلية لسعات حقل الفوتونات أى أن :

$$[a_s, a_{s'}'^{+}] = \delta_{\varkappa\varkappa'}(\delta_{ss'} - \varkappa_s^0 \varkappa_{s'}^0) \qquad (9.49)$$

وإذا كان للسعتين نفس الاندفاع ($\varkappa = \varkappa'$) ، نجد أن :

$$[a_s, a_{s'}^{+}] = \delta_{ss'} - \varkappa_s^0 \varkappa_{s'}^0 \qquad (9.50)$$

حيث $\varkappa^0$ متجه (شعاع الوحدة باتجاه اندفاع الفوتون) . ولكى تتحقق العلاقة الأخيرة يجب أن نفترض ، انظر أيضا (9.45)* ، أن :

$$\begin{aligned} a_s a_{s'}^{+} &= (1 + N)(\delta_{ss'} - \varkappa_s^0 \varkappa_{s'}^0) \\ a_{s'}^{+} a_s &= N(\delta_{ss'} - \varkappa_s^0 \varkappa_{s'}^0) \end{aligned} \qquad (9.51)$$

حيث N - العدد الكلى للجسيمات ذات الاندفاع $\hbar\varkappa$ ، بعد توسيط هذا العدد بحالتى الاستقطاب الممكنتين وفى الحالة الخاصة وعند غياب الجسيمات ذات الاندفاع $\varkappa$ فإن $N = 0$. كما نجد من (9.51) و (9.24) أن

$$H = \sum_{\varkappa} 2c\hbar\varkappa\left(N(\varkappa) + \frac{1}{2}\right) \qquad (9.52)$$

حيث يقابل المعامل 2 امكانيتى الاستقطاب ، عدا ذلك عندما تغيب الجسيمات $N(\varkappa) = 0$ تبقى طاقة صفرية تتحدد بالشكل التالى :

$$H_0 = \sum_{\varkappa} 2c\hbar\varkappa \frac{1}{2} \qquad (9.53)$$

---

* نلاحظ أن عند دراسة مسألة الاشعاع بشكل أدق ، لا بد من معرفة العلاقة (9.51) وحدها وكل العناصر المصفوفية الباقية أعطيت للايضاح فقط .

وهى ، رياضيا ، ناتجة عن مجموع الطاقات الصفرية لعدد لانهائى من الهزازات المكونة لحقل الفوتونات ، أما من الناحية الفيزيائية فتقابل الفراغ الكهرطيسى الذى يمثل خزانا للفوتونات ، بحيث « تخرج » منه الفوتونات الحقيقية عند اصدارها و « تدخل » إليه عند امتصاصها (الذرة مثلا) .

جـ) استنتاج معاملى اينشتين فى النظرية الكوانتية للاشعاع . لدراسة حركة الالكترونات فى حقل الفوتونات الحقيقية (الناتجة عن الانتقالات القسرية) أو الافتراضية أى التى لم تظهر بعد (الناتجة عن الانتقالات التلقائية) تستخدم معادلة شرودينجر غير المستقرة التى تكتب من أجل الكترون خاضع لحقلين كهربائى ومغناطيسى ، انظر (2.33) ، بالشكل التالى :

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}-V-\frac{1}{2m_0}\left(\mathrm{p}-\frac{e}{c}A\right)^2\right)\psi=0 \qquad (9.54)$$

وإذا أهملنا الحدود اللامتناهية فى الصغر من المرتبة الثانية المتناسبة مع A^2 واعتبرنا أن شرط عرضانية الأمواج الكهرطيسية لهذه الفوتونات ($\mathrm{div}\, A=0$) وكذلك العلاقة :

$$(\mathrm{p}A)\,\psi=(A\mathrm{p})\,\psi+\psi\,\frac{\hbar}{i}\,\mathrm{div}\,A$$

التى تؤدى إلى تبادل المؤثر p مع المؤثر A (فى الجداء العددى « السلمى ») أى أن :

$$(\mathrm{p}A)=(A\mathrm{p}) \qquad (9.55)$$

فإنه يمكن كتابة المعادلة (9.54) بالشكل :

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}-\mathrm{H}^0-V'(t)\right)\psi=0 \qquad (9.56)$$

حيث لا يتعلق الهاملتونيان H^0 بالزمن ، عند غياب حقل الفوتونات ، ويساوى

$$H^0 = V + \frac{1}{2m_0}\mathbf{p}^2$$

أما الطاقة الكامنة V' التى تعتبر طاقة اضطراب ، انظر البند ٨ ، فتتعلق بالزمن ، أى أن

$$V'(t) = -\frac{e}{cm_0}(A(t)\,\mathbf{p}) \qquad (9.57)$$

وعند حساب طاقة الاضطراب كما فى (9.57) نكتب عوضا عن متجه الكمون ، انظر (9.15) و (9.25) ، العبارة التالية :

$$A = \frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\varkappa}\sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{\varkappa}}\,[a(\varkappa)\,e^{-i\omega t+i\varkappa r} + a^{+}(\varkappa)\,e^{i\omega t-i\varkappa r}] \qquad (9.58)$$

بشرط أن تحقق السعات $a_s(\varkappa)$ العلاقات التبادلية (9.50) وان يكـون التواتر $\omega = c\,\varkappa$. عندئذ نستخلص العبارة لحساب $C_{n'}(t)$ طبقا لـ (8.56) العبارة التالية :

$$C_{n'}(t) = \frac{ie}{cm_0L^{3/2}\hbar}\sum_{\varkappa}\sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{\varkappa}}\Big[\int d^3x\,\psi^*_{n'}e^{i\varkappa r}(a(\varkappa)\,\mathbf{p})\,\psi_n \times$$
$$\times\frac{e^{i(\omega_{n'n}-\omega)t}-1}{i(\omega_{n'n}-\omega)} - \int d^3x\,\psi^*_{n'}e^{-i\varkappa r}(a^{+}(\varkappa)\,\mathbf{p})\,\psi_n\,\frac{e^{-i(\omega_{nn'}-\omega)t}-1}{i(\omega_{nn'}-\omega)}\Big] \qquad (9.59)$$

وعند دراسة إشعاع الفوتونات فقط يمكن اهمال الحد المتناسب مع $a^{+}(\varkappa)$ فى (9.59) (مؤثر الاصدار) أى أن

$$C_{n'}(t) = \frac{-e}{m_0L^{3/2}}\sum_{\varkappa}\sqrt{\frac{2\pi}{\omega\hbar}}\,\frac{e^{-i(\omega_{nn'}-\omega)t}-1}{(\omega_{nn'}-\omega)}\int d^3x\,\psi^*_{n'}e^{-i\varkappa r}(a^{+}\mathbf{p})\,\psi_n \qquad (9.60)$$

ومنه نحدد علاقة لحساب الاحتمال العام للانتقالين التلقائى والقسرى أى أن :

$$w_{nn'} = A_{nn'} + \rho(\omega)\,B_{nn'} = \frac{\partial}{\partial t}C^{+}_{n'}(t)\,C_{n'}(t) \qquad (9.61)$$

ونستخلص :

$$w_{nn'} = \frac{e^2}{L^3 m_0^2} \sum_{\varkappa} \frac{4\pi}{\hbar\omega} \frac{\sin t\,(\omega - \omega_{nn'})}{\omega - \omega_{nn'}} (aP^*_{n'n})(a^+ P_{n'n}) \qquad (9.62)$$

حيث أن :

$$P_{n'n} = \int d^3x \psi^*_{n'} e^{-i\varkappa r} \mathbf{p} \psi_n \qquad (9.63)$$

ولننتقل من السلسلة إلى التكامل بواسطة العلاقة* :

$$\frac{1}{L^3} \sum_{\varkappa} \rightarrow \frac{1}{8\pi^3} \int d^3\varkappa \qquad (9.64)$$

ثم نستخدم المساواة التالية :

$$\frac{1}{\pi} \frac{\sin(\omega - \omega_{nn'})\,t}{\omega - \omega_{nn'}} = \delta(\omega - \omega_{nn'}) \qquad (9.65)$$

التى تكون صحيحة عندما يكون الزمن كبيرا جدا

ملاحظة : تكون المساواة (9.65) ، عندما $t \rightarrow \infty$ ، مكافئة لما يلى

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sin(\omega - \omega_{nn'})\,t}{\omega - \omega_{nn'}} f(\omega)\, d\omega = f(\omega_{nn'}) \qquad (9.66)$$

ولبرهان صحة العلاقة الأخيرة ندخل التبديل التالى :

$$(\omega - \omega_{nn'})\,t = \xi$$

وإذا اعتبرنا $t \rightarrow \infty$ ، سيكون :

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\omega_{nn'} t}^{\infty} \frac{\sin \xi}{\xi} f\left(\omega_{nn'} + \frac{\xi}{t}\right) d\xi = f(\omega_{nn'}) \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin \xi}{\xi}\, d\xi$$

---

* لبرهان (9.64) يجب استخدام المساواة (9.11) التى تدل على أن : $\Delta\varkappa_x = \Delta\varkappa_y = \Delta\varkappa_z = \frac{2\pi}{L}$
وعليه نستخلص العلاقة (9.64) عندما ينتهى $L \rightarrow \infty$ إلى اللانهاية .

وإذا لاحظنا أن :

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin \xi}{\xi} d\xi = 1$$

وعليه إذا كانت المعادلة (9.66) صحيحة ستكون المعادلة (9.65) صحيحة أيضا وبصورة عامة نرى أن للتابع الموجود فى الطرف الأيسر من (9.65) نهاية عظمى حادة عندما $\omega = \omega_{nn'}$ لا تلبث ، بعد مرور زمن صغير $\Delta t = t$ اعتبارا من لحظة البدء ، ان « تتشتت » (لكنها تبقى مختلفة عن الصفر) فى مجال الترددات $|\Delta\omega| = |\omega - \omega_{nn'}|$ التى تحقق العلاقة $|\Delta\omega| \Delta t \sim 1$ وهو ما يقابل تشتت للطاقة طبقا للعلاقة :

$$|\Delta E| \Delta t \sim \hbar \qquad (9.67)$$

وتصنف هذه العلاقة كعلاقة اللاتعيين الرابعة وهى معروفة جيدا فى أى عملية موجية ، وخاصة فى علم الضوء الكلاسيكى حيث تصف اتساع الخطوط الطيفية بفترات محدودة للاشعاع .

تؤدى العلاقة (9.65) عندما $t \to \infty$ إلى فرضية بور أو إلى الصيغة الكوانتية لقانون مصونية الطاقة

$$\omega = \omega_{nn'} \qquad (9.68)$$

حيث

$$\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} \qquad (9.69)$$

وبالتالى لا يحدث الاشعاع إلا عند الانتقال من سويات الطاقة العليا إلى سويات أخفض $E_n > E_{n'}$. وإذا استعملنا بعد ذلك العلاقات التبادلية (9.51) فمن السهل البرهان على أن :

$$(a\dot{P}^{*}_{n'n})(a^{+}P_{n'n}) = S(1 + N(\omega\varkappa^0)) \qquad (9.70)$$

حيث

$$S = (P^*_{n'n} P_{n'n}) - (\varkappa^0 P^*_{n'n})(\varkappa^0 P_{n'n}) \tag{9.71}$$

ثم ننتقل إلى الاحداثيات الكروية للمتجه الموجى $\varkappa \left(\varkappa = \frac{\omega}{c},\ \vartheta,\ \varphi\right)$ وعندئذ يكون

$$d^3\varkappa = \frac{\omega^2\, d\omega\, d\Omega}{c^3} \tag{9.72}$$

حيث $d\Omega = \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi$ عنصر الزاوية المجسمة . وإذا اعتبرنا الاشعاع الخارجى متناحيا (متساوى المناحى) أى أن عدد الجسيمات لا يتعلق بالزاويتين ϑ , φ $(N = N(\omega))$ فإننا نجد ، بعد التكامل بواسطة التابع - δ ، قيمة احتمال الانتقال من أعلى إلى أسفل (مع اصدار الضوء*) :

$$w_{nn'} = \frac{e^2 \omega_{nn'}}{2\pi m_0^2 c^3 \hbar} (1 + N(\omega_{nn'})) \oint d\Omega\, S \tag{9.73}$$

مع العلم أن

$$w_{nn'} = A_{nn'} + \rho B_{nn'} \tag{9.74}$$

ومن العلاقتين الأخيرتين نحسب احتمال الانتقال التلقائى $(N = 0)$ بالعلاقة :

---

* مع ملاحظة أنه بعد التكامل بواسطة التابع - δ يجب أن نبدل فى عبارة S كل $c\varkappa$ بـ $\omega_{nn'}\varkappa^0$.

$$A_{nn'} = \frac{e^2 \omega_{nn'}}{2\pi m_0^2 c^3 \hbar} \oint d\Omega\, S \qquad (9.75)$$

أما احتمال الانتقال القسرى فيكون :

$$B_{nn'} = \frac{N}{\rho} A_{nn'} \qquad (9.76)$$

وكى نعبر عن عدد الجسيمات N بدلالة الكثافة ρ سننطلق من التصورات التالية : كثافة طاقة الحقل الكهرطيسى تساوى

$$u_{\text{rad}} = \int_0^\infty p(\omega)\, d\omega \qquad (9.77)$$

وباستخدام عدد الجسيمات $N(\omega)$ يمكن كتابة (9.77)

$$u_{\text{rad}} = \sum_{\varkappa} \frac{c\hbar\varkappa 2N(\omega)}{L^3} = \frac{2c\hbar 4\pi}{8\pi^3} \int_0^\infty \varkappa^3\, d\varkappa\, N(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega^3\, d\omega\, N(\omega) \quad (9.78)$$

ومن العلاقتين الأخيرتين نجد :

$$\frac{N}{\rho} = \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3} \qquad (9.79)$$

وبعد اعتماد (9.76) نجد أن :

$$B_{nn'} = \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3} A_{nn'} \qquad (9.80)$$

نحسب بعد ذلك احتمال الانتقال من سوية طاقة منخفضة n' إلى أخرى أعلى أى لنحسب احتمال الانتقال مع امتصاص الضوء . ولهذا يجب أن نبدل بين السويتين n (النهائية فى هذه الحالة) و n' (الابتدائية فى هذه الحالة) ونترك الحدود المتناسبة مع السعة $a(\varkappa)$ (مؤثر الامتصاص) وعندئذ نجد أن :

$$C_n(t) = \frac{e}{m_0 L^{3/2}} \sum_{\varkappa} \sqrt{\frac{2\pi}{\omega\hbar}} \frac{e^{i(\omega_{nn'}-\omega)t} - 1}{\omega_{nn'} - \omega} \int d^3x \psi_n e^{i\varkappa r} (a\mathbf{p}) \psi_{n'} \quad (9.81)$$

فإذا قارنا (9.81) مع (9.60) نجد أن طرفيهما الأيمن هما مقداران مركبان (عقديان) مترافقان وعند حساب مربع قيمتهما المطلقة يجب أن نحصل على نفس النتيجة ، رغم أن الاختلاف الرئيسى يكمن فى أن السعتين a و a^+ تكونان مؤثرات هنا ولهذا أهمية خاصة ، لأنه من (9.51) ينتج أن :

$$a_s a_s^+ \sim (1 + N)$$
$$a_s^+ a_s \sim N \neq a_s a_s^+$$

ولهذا نحصل عند امتصاص الضوء $w_{n'n}$ على النتيجة (9.73) التى استبدل فيها المضروب ($1 + N(\omega_{nn'})$) بالمضروب $N(\omega_{nn'})$ أى أن

$$w_{n'n} = \rho B_{n'n} = \frac{e^2 \omega_{nn'}}{2\pi m_0^2 c^3 \hbar} N(\omega_{nn'}) \oint d\Omega\, S \quad (9.82)$$

ان غياب « الواحد » يعنى أن الإمتصاص سيكون قسريا (والامتصاص التلقائى لا يمكن أن يحدث) . وإذا قارنا (9.82) مع (9.73) نجد أن :

$$B_{n'n} = B_{nn'} \quad (9.83)$$

أى أن احتمالى الانتقالين القسريين من الأعلى إلى الأسفل وبالعكس متساويان ويتناسبان مع احتمال الانتقال التلقائى ، انظر (9.80) . وإذا عوضنا (9.80) و (9.83) فى (9.6) نحصل على البرهان الكوانتى لعلاقة بلانك

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad (9.84)$$

التى تصف توزع الكثافة الطيفية للاشعاع المتوازن . ومن المفيد أن نذكر أنه تم الحصول على علاقة بلانك للمرة الأولى من مبدأ التقابل وذلك بتعميم النظرية الكلاسيكية المقابلة على الحالة الكوانتية .

د) الاشعاع ثنائى الأقطاب والاشعاع المغناطيسى (ثنائى الأقطاب) والاشعاع رباعى الأقطاب . لندرس إشعاعا تلقائيا بدقة أكثر من إشعاع ثنائى الأقطاب ، فإذا فرضنا فى (9.73) أن $N = 0$ فإننا نجد أن احتمال الانتقال يعطى بالعلاقة :

$$w_{nn'} = A_{nn'} = \frac{e^2 \omega_{nn'}}{2\pi m_0^2 c^3 \hbar} \oint d\Omega\, S \qquad (9.85)$$

حيث يحسب S بالعلاقة (9.71) أما $p_{nn'}$ فيحسب بالعلاقة (9.63) وبمعرفة احتمال الانتقال التلقائى يمكن حساب شدة الاشعاع المقابلة بالعلاقة :

$$W_{nn'} = \hbar\, \omega_{nn'}\, A_{nn'} \qquad (9.86)$$

ثم حساب احتمال الانتقالات القسرية بالعلاقتين (9.80) و (9.83) مع العلم أن المقدار $(\varkappa r) \sim r/\lambda$ هو مقدار صغير عند حساب العنصر المصفوفى (9.63) ، إذ أن طول موجة الضوء المشع $\lambda \sim 10^{-5}\text{cm}$ أما أبعاد الذرة فهى من مرتبة 10^{-8}cm وبالتالى يكون $r/\lambda \sim 10^{-3} \ll 1$. وفى المستقبل سنأخذ بعين الاعتبار حدودا أخرى ، عدا حد ثنائى الأقطاب الذى لا يتعلق بـ $(\varkappa r)$ ، تتناسب مع $(\varkappa r)$ وتسمح لنا بحساب ما يسمى بإشعاع رباعى الأقطاب والإشعاع المغناطيسى (ثنائى الأقطاب) فإذا فرضنا أن

$$e^{-i\varkappa r} \approx 1 - i(\varkappa r) \qquad (9.87)$$

نجد لحساب العنصر المصفوفى (9.63) القيمة التالية :

$$\boldsymbol{P}_{n'n} \approx \boldsymbol{p}_{n'n} - i\,((\varkappa \boldsymbol{r})\,\mathrm{p})_{n'n} \qquad (9.88)$$

حيث $\boldsymbol{P}_{n'n} = \int \psi_{n'}^{*} \mathrm{p} \psi_n d^3x$ هو عنصر مصفوفة مؤثر الاندفاع ، وإذا استفدنا بعد ذلك من المطابقة التالية :

$$\omega_{n'n}(f(r))_{n'n} = \frac{1}{\hbar}(\mathrm{H}f(r) - f(r)\,\mathrm{H})_{n'n} =$$
$$= \frac{1}{m_0}\left(\frac{1}{i}(\nabla f \mathrm{p}) - \frac{\hbar}{2}\nabla^2 f\right)_{n'n} \quad (9.89)$$

التى يمكن الحصول عليها بسهولة إذا عوضنا فيها عبارة الهاملتونيان بقيمتها التالية :

$$\mathrm{H} = \frac{\mathrm{p}^2}{2m_0} + V(r) \qquad (9.90)$$

مع العلم أن المؤثر فى (9.89) يؤثر على التابع $f(r)$ وحده . وإذا فرضنا فى (9.89) أن التابع f يساوى x نجد أن :

$$-\omega_{nn'}x_{n'n} = \frac{1}{m_0 i}(p_x)_{n'n}$$

أو بالشكل المتجهى (الشعاعى) :

$$p_{n'n} = -im_0\omega_{nn'}r_{n'n} \qquad (9.91)$$

وإذا فرضنا بعدئذ أن $f = x\,(\varkappa r)$ فإننا نجد أن :

$$-\omega_{nn'}(x(\varkappa r))_{n'n} = \frac{1}{m_0 i}((\varkappa r)\,p_x + x(\varkappa p) - i\hbar\varkappa_x)_{n'n}$$

ونلاحظ أن الحد الأخير فى الطرف الأيمن يساوى الصفر بسبب تعامد التوابع الخاصة $(n' \neq n)$

$$(\varkappa_x)_{n'n} = \varkappa_x\delta_{n'n} = 0$$

ولهذا يمكن كتابة العلاقة الأخيرة كما يلى :

$$-\omega_{nn'}(r(\varkappa r))_{n'n} = \frac{1}{im_0}((\varkappa r)\,\mathrm{p} + r(\varkappa \mathrm{p}))_{n'n} \qquad (9.92)$$

وإذا أخذنا بعين الاعتبار (9.92) فيمكن كتابة الحد الثانى من الطرف الأيمن فى (9.88) بالشكل التالى :

$$(\varkappa r)\,p = \frac{1}{2}(\varkappa r)\,p + \frac{1}{2}(\varkappa r)\,p = \frac{1}{2}(\varkappa r)\,p - \frac{1}{2}\,r\,(\varkappa p) - \frac{im_0\omega_{nn'}}{2}\,r\,(\varkappa r)$$

ومنه نجد لحساب العنصر المصفوفى (9.88) العبارة التالية :

$$P_{n'n} = -\,im_0\omega_{nn'}r_{n'n} + \frac{i}{2}\left([\varkappa\,[rp]]\right)_{n'n} - \frac{m_0\omega_{nn'}}{2}\left(r\,(\varkappa r)\right)_{n'n} \quad (9.93)$$

حيث يصف الحد الأول من الطر ف الأيمن الاشعاع ثنائى الأقطاب العادى والثانى يصف الأشعاع المغناطيسى (ثنائى الأقطاب) أما الثالث فيصف ما يسمى بالأشعاع رباعى الأقطاب . ولنحسب قبل كل شىء احتمال انتقالات ثنائيات الأقطاب . فإذا عوضنا الحد الأول من (9.93) فى (9.71) نجد أن :

$$S = m_0^2\omega_{nn'}^2\left[(r^*_{n'n}r_{n'n}) - (\varkappa^0 r^*_{n'n})(\varkappa^0 r_{n'n})\right]$$

ويسهل تكامل المساواة الأخيرة بالنسبة للزوايا بواسطة العلاقتين التاليتين :

$$\oint d\Omega = 4\pi$$

$$\oint (\varkappa^0 A)(\varkappa^0 B)\,d\Omega = \frac{4\pi}{3}(AB) \quad (9.94)$$

وعندئذ نجد احتمال الانتقال الذى يعطى الاشعاع ثنائى الأقطاب أى أن :

$$A_{nn'}^{\text{dip}} = \frac{4}{3}\frac{e^2\omega_{nn'}^3}{\hbar c^3}|r_{n'n}|^2 \quad (9.95)$$

حيث

$$|r_{n'n}|^2 = |x_{n'n}|^2 + |y_{n'n}|^2 + |z_{n'n}|^2 \quad (9.96)$$

وعند ادخال العنصر المصفوفى للعزم ثنائى الأقطاب

$$d_{n'n} = e r_{n'n} \quad (9.97)$$

يمكن كتابة (9.95) كما يلى :

$$A_{nn'}^{\text{dip}} = \frac{4}{3}\frac{\omega_{nn'}^3}{\hbar c^3}|\,d_{n'n}|^2 \qquad (9.98)$$

ولنتابع حساب احتمال الانتقالات التى تسبب الاشعاع المغناطيسى . فإذا عوضنا الحد الثانى من (9.93) فى العلاقة (9.71) وأخذنا بعين الاعتبار المؤثر :

$$\mu = \frac{e}{2m_0c}[\boldsymbol{r}\mathrm{p}] \qquad (9.99)$$

الذى يلعب دور العزم المغناطيسى فى التقريب الكلاسيكى فإننا نحصل على ما يلى :

$$S = \frac{m_0^2\omega_{nn'}^2}{e^2}\left[\left(\mu_{n'n}^*\mu_{n'n}\right) - \left(\varkappa^0\mu_{n'n}^*\right)\left(\varkappa^0\mu_{n'n}\right)\right] \qquad (9.100)$$

وإذا اعتبرنا عند التكامل بالزوايا المساواة (9.94) فإننا نحصل لحساب الانتقالات المغناطيسية على العبارة التالية :

$$A_{nn'}^{\text{magn}} = \frac{4\omega_{nn'}^3}{3\hbar c^3}|\,\mu_{n'n}|^2 \qquad (9.101)$$

وهذا يشبه الحالة الكلاسيكية حيث يختلف الاشعاع المغناطيسى عن الكهربائى بتغيير العزم ثنائى الأقطاب الكهربائى بعزم الأقطاب المغناطيسى . وسنرى فيما بعد أن احتمال الانتقالات المغناطيسية (وخاصة فى الذرة) أصغر بعدة مرات من احتمال الانتقالات الكهربائية ، ولذلك نحسب أخيرا احتمال الانتقالات التى تعطى الاشعاع رباعى الأقطاب . فبتعويض الحد الثانى فى الطرف الأيمن من (9.93) فى (9.71) نجد أن :

$$S = \frac{m_0^2\omega_{nn'}^4}{4c^2}\left[\left(x_s(\varkappa^0\boldsymbol{r})\right)_{n'n}^*\left(x_s(\varkappa^0\boldsymbol{r})\right)_{n'n} - \left((\varkappa^0\boldsymbol{r})(\varkappa^0\boldsymbol{r})\right)_{n'n}^*\left((\varkappa^0\boldsymbol{r})(\varkappa^0\boldsymbol{r})\right)_{n'n}\right] \qquad (9.102)$$

حيث يتم الجمع بالوسيط ، الذى يظهر مرتين ، من 1 حتى 3 $(x_1 = x, \ (x_2 = y, \ (x_3 = z)$ ، ويجب عند الاستكمال بالزوايا فى هذه الحالة اعتبار (9.94) و

$$\oint (\varkappa^0 A)(\varkappa^0 B)(\varkappa^0 C)(\varkappa^0 D)\, d\Omega =$$

$$= \frac{4\pi}{15}\left[(AB)(CD) + (AC)(BD) + (AD)(BC)\right] \quad (9.103)$$

صحيحتين . وعندئذ وباعتبار صحة (9.85) فإننا نجد لحساب انتقالات رباعيات الأقطاب العلاقة التالية :

$$A_{nn'}^{\text{quadr}} = \frac{e^2\omega_{nn'}^5}{30c^5\hbar}\left[3\,(x_s x_{s'})_{n'n}^{*}\,(x_s x_{s'})_{n'n} - (r^2)_{n'n}^{*}\,(r^2)_{n'n}\right] \quad (9.104)$$

وإذا اعتبرنا بعدئذ العزم رباعى الأقطاب (التنزر أو الرتل)

$$Q_{ss'} = e\left(3x_s x_{s'} - r^2\delta_{ss'}\right)$$

فإننا نجد أخيرا

$$A_{nn'}^{\text{quadr}} = \frac{\omega_{nn'}^5}{90c^5\hbar}\,(Q_{ss'})_{n'n}^{*}\,(Q_{ss'})_{n'n} \quad (9.105)$$

د) **اشعاع الهزاز التوافقى** . لندرس من خلال الهزاز التوافقى بعض المسائل المتعلقة بالاشعاع التلقائى ، لقد برهنا فى البند السابع أن العناصر المصفوفية التى لا تساوى الصفر هى :

$$x_{n-1,\,n} = x_0\sqrt{\frac{n}{2}}$$

$$x_{n+1,\,n} = x_0\sqrt{\frac{n+1}{2}} \quad (9.106)$$

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0\omega}}$$

أى أن انتقالات ثنائى الأقطاب مسموحة فقط بين سويتين متجاورتين وبالتالى فإن قواعد الانتقاء لاشعاع ثنائى الأقطاب هى التالية :

$$\Delta n = n - n' = \pm 1 \qquad (9.107)$$

وبصورة خاصة نرى أن الانتقال التلقائى مسموح فقط عندما $n \to n - 1$ ، انظر الشكل (٩ ـ ١) ، أما التردد المقابل فهو :

$$\omega_{n,\, n-1} = \frac{E_n - E_{n-1}}{\hbar} = \omega \qquad (9.108)$$

وهو يساوى تردد الاهتزاز الميكانيكى ، وقد اعتبرنا هنا أن $E_n = \hbar\omega(n + {}^1/_2)$ طبقا لـ (7.28) . أما كثافة الاشعاع فنحسبها طبقًا لـ (9.86) و (9.95) ، بالعلاقة التالية :

$$W^{\text{dip}}_{n,\, n-1} = {}^2/_3 \frac{e^2\omega^2}{m_0c^3} n\hbar\omega = {}^2/_3 \frac{e^2\omega^2}{m_0c^3} (E_n - E_0) \qquad (9.109)$$

حيث

$$E_0 = {}^1/_2\hbar\omega$$

وإذا فرضنا أن $\hbar \to 0$ فإننا نحصل على العبارة الكلاسيكية المعروفة لحساب طاقة اشعاع الهزاز التوافقى :

$$W^{\text{dip}} = {}^2/_3 \frac{e^2\omega^2}{m_0c^3} E \qquad (9.110)$$

أما الانتقالات إلى سويات أعلى $n \to n + 1$ فهى جائزة عند حدوث الامتصاص القسرى . وعليه يطرح السؤال : هل يمكن حدوث اشعاعات المتوافقيات العليا فى حالة الهزاز التوافقى ؟ وللاجابة على هذا السؤال نحسب كثافة الاشعاع رباعى الأقطاب التى تتناسب مع العنصر المصفوفى $(x^2)_{n'n}$ طبقا للعلاقة :

$$Q_{yy} = Q_{zz} = -e(x^2), \quad Q_{xx} = 2e(x^2) \qquad (9.111)$$

وإذا استفدنا من (9.86) و (9.105) فيمكن لحساب شدة الاشعاع رباعى الأقطاب استخلاص العلاقة التالية :

$$W_{nn'}^{\text{quadr}} = \frac{e^2\omega_{nn'}^6}{15c^5}(x^2)_{n'n}^2 \qquad (9.112)$$

وإذا علمنا أن العناصر المصفوفية $(x^2)_{n'n}$ ، انظر (8.38) ، تعطى بالعلاقات التالية :

$$(x^2)_{n-2,\,n} = \frac{x_0^2}{2}\sqrt{n(n-1)}$$
$$(x^2)_{n+2,\,n} = \frac{x_0^2}{2}\sqrt{(n+2)(n+1)} \qquad (9.113)$$
$$(x^2)_{n,\,n} = x_0^2\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

فيمكن كتابة قواعد الانتقاء الخاصة بالاشعاع رباعى الأقطاب بالشكل التالى :

$$\Delta n = n - n' = 0, \ \pm 2 \qquad (9.114)$$

وعندما يكون الاشعاع تلقائيا حيث $n \to n-2$ نرى أنه لا تنتج القيمة الأساسية (كما فى انتقالات ثنائى الأقطاب) وإنما المتوافقى الأول :

$$\omega_{n,\,n-2} = \frac{E_n - E_{n-2}}{\hbar} = 2\omega \qquad (9.115)$$

فإذا لاحظنا العلاقتين (9.113) و (9.115) فإننا نجد أن :

$$W_{n,\,n-2}^{\text{quadr}} = \frac{16e^2}{15c^5}\frac{\hbar^2\omega^4}{m_0^2}n(n-1) \qquad (9.116)$$

وفى التقريب الكلاسيكى عندما $E \to \hbar\omega n$ نجد أن:

$$W^{\text{quadr}} = \frac{16e^2}{15c^5}\frac{E^2\omega^2}{m_0^2} \qquad (9.117)$$

ومن (9,107 و 9.117) تستنتج قواعد الانتقاء العامة فنرى أن الانتقالات الموافقة لثنائيات الأقطاب تحدث عندما $\Delta n = \pm 1$ أما الانتقالات الموافقة لرباعيات الأقطاب فتحدث عندما $\Delta n = 0, \pm 2$. وبما أن زوجية التابع الموجى تتعين بالعدد الكوانتى ، انظر (7.42) ، فإن الانتقالات التى تعطى اشعاعا ثنائى الأقطاب مسموحة من سوية زوجية إلى أخرى فردية وبالعكس أما انتقالات رباعى الأقطاب فهى ممنوعة من سوية فردية إلى أخرى فردية أو من زوجية إلى أخرى زوجية . ولنحسب الآن نسبة شدتى الاشعاع فنجد من (9.117) و (9.100) أن :

$$\frac{W_{\text{quadr}}}{W_{\text{dip}}} = \frac{8}{5}\frac{E}{m_0 c^2} \sim \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 \qquad (9.118)$$

حيث $a^2 = \frac{2E}{m_0 \omega^2}$ — مربع السعة الكلاسيكية للاهتزاز أى أن احتمال الانتقالات رباعى الأقطاب أصغر بكثير من احتمال انتقالات ثنائى الأقطاب فى التقريب اللانسبى $(E << m_0 c^2)$. ولنكتب أخيرا قواعد الانتقاء لانتقالات ثنائيات الأقطاب عند أشعاع الهزاز التوافقى :

$$\Delta n = \pm 1 \qquad (9.119)$$

أما قواعد الانتقاء لانتقالات رباعيات الأقطاب فهى* :

$$\Delta n = 0, \ \pm 2 \qquad (9.120)$$

هذا ولا توجد انتقالات مغناطيسية للهزاز التوافقى بسبب انعدام العزم الحركى وبالتالى المغناطيسى فى الحركة المستقيمة .

---

* يقال فى الضوء عن انتقالات ثنائيات الأقطاب أنها انتقالات مسموحة كما يقال عن الانتقالات الباقية بأنها ممنوعة حتى ولو كانت مسموحة بالنسبة لاشعاع رباعيات الأقطاب والاشعاع المغناطيسى ، ويجب أحيانا حساب هذه الأخيرة خاصة إذ يحدث فى كثير من الحالات أن تكون بعض الخطوط الطيفية الممنوعة لثنائى الأقطاب ناتجة عن اشعاع رباعيات أو الاشعاع المغناطيسى . ويكون طول موجة الضوء الناتج عن الجمل الذرية - الجزيئية ($\lambda \sim 10^{-5}$ cm) أكبر بكثير من أبعاد الذرة ($a \sim 10^{-8}$ cm) ولهذا يصغر احتمال اشعاع رباعى الأقطاب ، انظر (9.118) ، بمقدار 10^7 مرة بالمقارنة مع احتمال اشعاع ثنائى الأقطاب .

و) **لمحة عن المضخمات والمولدات الكوانتية .** لقد لاقت مؤخرا نظرية الاشعاع القسرى أو المحرض تطبيقا هاما جدا بفضل اختراع المضخمات والمولدات الكوانتية من قبل العالمين السوفياتيين باسوف وبروخوروف . وتوخيا للسهولة سندرس جملة مؤلفة من سويتى طاقة E_1 و $E_2 > E_1$ ، إذ يحدث الاشعاع التلقائى عن انتقالات تجرى ذاتيا من E_2 إلى E_1 (احتمال الانتقال A_{21}) ، وينطلق باتجاهات مختلفة وبأطوار غير متناسقة ولذلك يسمى بالاشعاع المتبعثر أما اتجاه انتشار واستقطاب الاشعاع القسرى المحرض فيتطابق مع اتجاه انتشار وطور استقطاب الاشعاع الكهرطيسى الخارجى (مع العلم أن احتمال الانتقال هنا هو ρB_{21} حيث ρ هى الكثافة الطيفية للاشعاع الخارجى الوارد). وهذا يعنى أن الاشعاع القسرى يكون متجمعا . ويحسب احتمال الانتقال من سوية أعلى إلى سوية أدنى $(E_2 - E_1)$ بالعلاقة* :

$$w_{21} = A_{21} + \rho B_{21} \qquad (9.121)$$

ويجب أن تتراوح ترددات الاشعاع الخارجى ضمن حدود الانتقال الرنينى بتردد قدره :

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} > 0 \qquad (9.122)$$

وتوخيا للبساطة سنقتصر على دراسة الانتقالات الرنينية (التجاوبية) $(\omega = \omega_{21})$ وفى هذه الحالة يمكن للجملة أن تنتقل من سوية أدنى إلى سوية أعلى ، تحت تأثير الاشعاع الخارجى وذلك بامتصاصها لكوانت من الطاقة ، حيث أن احتمال هذا الانتقال يساوى :

$$w_{12} = \rho B_{12}, \qquad (9.123)$$

---

* بما أننا سنهتم بالدراسة الكمية للمسألة فسنقتصر على دراسة الاشعاع متساوى المناحى ، أما تعميم ذلك على انتشار الأشعة فى اتجاه معطى فيمكن ايجاده فى المراجع الخاصة بذلك .

فإذا رمزنا لعدد الذرات فى وحدة الحجوم ذات الطاقة E_2 بالرمز N_2 وعدد الذرات ذات الطاقة E_1 بالرمز N_1 حيث يسمى العددان N_2 و N_1 بانشغالية السويات وعندئذ تساوى شدة (قوة) الاشعاع المتحرض :

$$p_{21} = \hbar\omega_{21}N_2B_{21}\rho \quad (9.124)$$

وبنفس الطريقة نحسب شدة الامتصاص المتحرض :

$$p_{12} = \hbar\omega_{12}N_1B_{12}\rho = -\hbar\omega_{21}N_1B_{12}\rho \quad (9.125)$$

واذا اعتبرنا طبقا للعلاقة (9.83) أن $B_{21} = B_{12}$ فيمكن حساب شدة الاشعاع المتحرض والامتصاص المتحرض بالعلاقة التالية :

$$p = p_{21} + p_{12} = \hbar\omega_{21}\rho B_{21}(N_2 - N_1) \quad (9.126)$$

وعند حدوث التوازن الترموديناميكى فإنه بمعرفة درجة الحرارة T تتعين تماما كثافة انشغال السويات ، أى معرفة توزع الذرات على سويات الطاقة :

$$N_2 = Ce^{-\frac{E_2}{k_BT}}, \quad N_1 = Ce^{-\frac{E_1}{k_BT}} \quad (9.127)$$

ومنه ينتج دائما أن :

$$N_1 > N_2 \quad (9.128)$$

ولهذا يجب أن يمتص دوما الاشعاع الكهرطيسى الذى يمر عبر المادة الواقعة فى حالة التوازن الترموديناميكى ($p < 0$) . ولتسعير الاشعاع ينبغى أن تختل حالة التوازن الترموديناميكى وأن تظهر مجموعة ذرات أو جزيئات ، تكون السويات الدنيا لها أقل انشغالا من سوياتها العليا ($N_1 < N_2$) ويقال عندئذ أن لهذه المجموعة انشغالا عكسيًا . ويمكن خلق التضخيم على هذا

الأساس ، مبدئيا بالنسبة لكل الجسيمات ، فإذا اعتمدنا مفهوم الحرارة السابق فإننا نجد باستخدام العلاقة

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{k_B T}} \qquad (9.129)$$

انه يجب فى حالة الانشغال العكسى ($N_2 > N_1$) أن تكون الحرارة T سالبة ($T < 0$) ونلاحظ أن مفهوم درجة الحرارة السالبة اصطلاحى صرف ، ويمكن أن ينسب إلى سويتين فقط وإلى وقت قصير وصغير بالمقارنة مع زمن التأرجح (ولا تكون هذه الحالة متوازنة ترموديناميكيا). وفى الحالة المعاكسة تحدد درجة الحرارة فى وضع التوازن الترموديناميكى كثافة الانشغال بكل الحالات الطاقوية وفى كل لحظة من الزمن . ويجب التأكيد هنا أن الاشعاع التلقائى يخفض من زمن وجود الالكترون على سوية عليا أى أنه يقلل من عمر الحالات المعكوسة آنفة الذكر . ولنفرض أن الانتقال $E_2 - E_1$ يحدث عن طريق ثنائيات الأقطاب أى يسمح به ، وعندئذ يمكن حساب زمن بقاء الالكترون على سوية عليا τ_{sp} من العلاقة* :

$$\frac{1}{\tau_{sp}} = A_{21}^{dip} \sim \frac{e_0^2}{\hbar c} \cdot \frac{ca^2}{\lambda^3} = \frac{1}{137} \frac{ca^2}{\lambda^3} \qquad (9.130)$$

حيث يسمى المقدار $\frac{e_0^2}{c\hbar} \approx \frac{1}{137}$ بثابت البنية الدقيقة أما a فهو سعة الاهتزاز وهو من رتبة $10^{-9}cm - 10^{-8}$ وفى المجالات الاشعاعية ($\lambda \sim 1cm$) يكون زمن الاشعاع التلقائى لثنائى الأقطاب ($\tau_{sp} = 10^7 sec$) لأنه يتناسب مع λ^3 اما τ_{ind} فيساوى طبقا لـ (9.80) إلى :

$$\frac{1}{\tau_{ind}} = \rho B_{21} \sim \frac{\rho c a^2}{137\hbar} \qquad (9.131)$$

---

* للحصول على (9.130) نستخدم العلاقة (9.110) التى تعطى كثافة الاشعاع التلقائى لثنائى الأقطاب للهزاز التوافقى (لاحتمال الانتقال فى الجمل الأخرى من نفس المرتبة) فإذا فرضنا فى (9.110) أن $E_0 = \frac{m_0 a^2 \omega^2}{2}$ وقسمنا كل المساواة على $\hbar\omega$ نحصل على (9.130) .

وهو لا يتعلق بـ λ ويمكن جعله أصغر بكثير من τ_{sp} عندما تأخذ ρ قيما أكبر ، وعندئذ يمكن اعتبار الاشعاع القسرى أكبر بكثير من كثافة الاشعاع التلقائى وبفضل هذا يمكن اعتبار الاشعاع التلقائى تشويشا فقط . أما فى المجالات الضوئية ($\lambda = 10^{-4}cm - 10^{-5}cm$) وعندما تسمح بالانتقـالات (العلاقة 9.130) نرى أن الزمن $\tau_{sp} \sim 10^{-7}sec$ ولتضخيم هذا الزمن من المفضل أن نأخذ سويات طاقوية تكون الانتقالات منها إلى السوية الأساسية ممنوعة (أى يجب أن لا توجد انتقالات ثنائى الأقطاب ($A_{21}^{dip} = 0$) . وإذا فرضنا امكانية حدوث انتقالات من نوع رباعيات الأقطاب بين السويات فإنه يمكن حساب زمن الانتقال من العلاقتين (9.130) و (9.118) ، حيث نجد أن :

$$\frac{1}{\tau_{sp}} = A_{21}^{quadr} \sim \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 \frac{ca^2}{137\lambda^3} \qquad (9.132)$$

وفى المجالات الضوئية ، خاصة ($\lambda \sim 10^{-5}cm$) يمكن تخضيم زمن الانتقالات الخاص برباعى الأقطاب إلى ثانية واحدة . ولقد صممت المضخمات الكوانتية الحديثة وكذلك المولدات (المازرات واللازيرات) اعتمادا على خلق كثافة انشغال عكسية ، بشكل أو بآخر ، ونتيجة لذلك يجب أن يحدث تضخيم أو توليد للاشعاع بعد عبور الموجات الكهرطيسية إلى الذرة .

ز) **أسس نظرية التبدد (التشتت)** . لقد وجدت نظرية الاضطراب تطبيقا لها عند دراسة تفاعل الضوء مع المادة . وجوهر المسألة هنا هو اختلاف النتائج المستخلصة بالطريقة الكوانتية عن المستخلصة بالطريقة الكلاسيكية مع العلم أن التحقيق التجريبى كان لصالح نتائج النظرية الكوانتية . لندرس نظرية التبدد (أى نظرية تشتت أو تناثر الضوء فى وسط ما) ، ففى الأوساط العازلة التى توصف طبقا للتصورات الكلاسيكية ، بقرنية انكسار $n = \sqrt{\varepsilon}$ حيث ε هى نفاذية العازل (وتكون

النفائية المغناطيسية عندئذ مساوية الواحد ($\mu = 1$) ، ومن المعلوم أنه إذا ازداد تردد الضوء المار عبر المادة تزداد قرنية الانكسار $\left(\frac{dn}{d\omega} > 0\right)$ ويسمى هذا التبدد عاديا ، وأوضح مثال عليه ، هو التحليل الطيفي للضوء العادى بواسطة المواشير الزجاجية أو الكوارتزية حيث تنحرف الأشعة البنفسجية عن الاتجاه الأساسى أكثر من الأشعة الحمراء ، أما التشتت الشاذ $\left(\frac{dn}{d\omega} < 0\right)$ فيلاحظ فى مجال الترددات التى يمتصها الوسط ، ولحساب قرنية الانكسار n نستخدم العلاقة بين متجه شدة الحقل الكهربائى $\mathscr{E}$ ومتجه التحريض $\mathscr{D}$ وقيمةالاستقطاب$\mathscr{P}$ أى التالية :

$$\mathscr{D} = \varepsilon\mathscr{E} = \mathscr{E} + 4\pi\mathscr{P} \qquad (9.133)$$

ومنه إذا اعتبرنا أن $\varepsilon = n^2$ نجد أن :

$$\mathscr{P} = \frac{n^2 - 1}{4\pi}\mathscr{E} \qquad (9.134)$$

وهكذا نرى أنه لحساب n يجب معرفة العلاقة* بين $\mathscr{P}$ و $\mathscr{E}$ انطلاقا من التصورات المجهرية لبنية المادة . ولننتقل الآن إلى بناء النظرية الكوانتية للتبدد ، ولهذا نفرض أن كل الكترونات الذرات تقع فى حالة كوانتية وحيدة k ، ولحل مسألتنا هذه نستفيد من نظرية الاضطراب لأن طاقة التفاعل مع الحقل الخارجى ، بصورة عامة ، ستكون صغيرة بالمقارنة مع طاقة ارتباط الالكترونات فى الذرات . وإذا لاحظنا أن القوة الخارجية المؤثرة على الالكترون فى الحالة اللانسبية (أى باهمال القوة المغناطيسية) تساوى :

$$F_x = -e_0\mathscr{E}_0 \cos \omega t, \quad F_y = F_z = 0$$

---

* ان الاستقطاب $\mathscr{P}$ طبقا لتعريفه ، هو محصلة العزوم الكهربائية للذرات فى وحدة الحجوم .

فإننا نجد لحساب طاقة الأضطراب* العبارة التالية :

$$V' = e_0 x \mathscr{E}_0 \cos \omega t \tag{9.135}$$

وعليه نكتب معادلة شرودينجر للالكترون كما يلى :

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - \mathrm{H}^0 - V'\right)\psi_\kappa(t) = 0 \tag{9.136}$$

حيث H_0 الهاملتونيان عند غياب الاضطراب . وإذا فرضنا أنه عندما $V' = 0$ يكون للمعادلة (9.136) حل دقيق شكله :

$$\psi_\kappa^0(t) = \psi_\kappa^0 e^{-(i/\hbar)E_\kappa t} = \psi_\kappa^0 e^{-i\omega_\kappa t} \tag{9.137}$$

حيث ψ_κ^0 و E_k تحققان المعادلة :

$$\left(E_\kappa - \mathrm{H}^0\right)\psi_\kappa^0 = 0 \tag{9.138}$$

وعندئذ ، وطبقا لنظرية الاضطراب ، نبحث عن حل شكله :

$$\psi_\kappa(t) = \psi_\kappa^0(t) + \psi_\kappa'(t) \tag{9.139}$$

فإذا أخذنا بعين الاعتبار المساواة :

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - \mathrm{H}^0\right)\psi_\kappa^0(t) = 0 \tag{9.140}$$

فاننا سنجد لحساب $\psi_\kappa'(t)$ فى التقريب الأول المعادلة التالية :

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - \mathrm{H}^0\right)\psi_\kappa'(t) = V'\psi_\kappa^0(t) \tag{9.141}$$

• يمكن اعتبار الحقل الكهربائى ثابتا لأنه مستقل عن r بالنسبة للأبعاد التى هى من رتبة أبعاد الذرة .

وإذا بدلنا V' بقيمتها من (9.135) نجد أن :

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}-H^0\right)\psi'_\kappa(t)={}^1\!/_2 e_0 x \mathscr{E}_0 \psi^0_\kappa \{e^{-it(\omega_\kappa-\omega)}+e^{-it(\omega_\kappa+\omega)}\}. \quad (9.142)$$

ولكى نحذف الزمن فى هذه المعادلة نبحث عن الحل $\psi'_\kappa(t)$ بالشكل التالى :

$$\psi'_\kappa(t)=ue^{-it(\omega_\kappa-\omega)}+ve^{-it(\omega_\kappa+\omega)} \quad (9.143)$$

وعندئذ لحساب كل من u و v نحصل على المعادلتين التاليتين :

$$\{\hbar(\omega_\kappa-\omega)-H^0\}u={}^1\!/_2 e_0 x\mathscr{E}_0\psi^0_\kappa \quad (9.144)$$

$$\{\hbar(\omega_\kappa+\omega)-H^0\}v={}^1\!/_2 e_0 x\mathscr{E}_0\psi^0_\kappa \quad (9.145)$$

ولنلاحظ أن للمعادلتين الأخيريتين نفس التركيب ولهذا يكفى حساب التابع u وعندئذ لحساب v يلزم تبديل ω بـ $-\omega$. وبما أن المعادلة (9.144) لا تحوى الزمن بشكل صريح فلحساب التابع v يمكن استخدام طريقة نظرية الاضطراب المستقرة فنبحث عن الحل بشكل نشر التوابع الخاصة للمسألة غير المضطربة ، انظر (8.8) ، أى أن :

$$u=\sum_{\kappa''}C_{\kappa''}\psi^0_{\kappa''} \quad (9.146)$$

حيث يحقق $\psi^0_{\kappa''}$ المعادلة التالية :

$$(E_{\kappa''}-H^0)\psi^0_{\kappa''}=0 \quad (9.147)$$

ومن المساوتين الأخيرتين نجد أن :

$$\hbar\sum_{\kappa''}C_{\kappa''}(\omega_{\kappa\kappa''}-\omega)\psi^0_{\kappa''}=\frac{e_0 x\mathscr{E}_0}{2}\psi^0_\kappa \quad (9.148)$$

حيث يعطى تردد الاشعاع بالعلاقة الآتية :

$$\omega_{\kappa\kappa''} = \frac{E_\kappa - E_{\kappa''}}{\hbar} \qquad (9.149)$$

وبضرب (9.148) من اليسار بـ $\psi^{0*}_{\kappa'}$ واجراء التكامل فى الفراغ كله ، نجد بعد تطبيق شروط التعامد والمعايرة على التوابع الخاصة ، لحساب C_k العلاقة التالية :

$$C_{\kappa'} = -\frac{e_0\mathscr{E}_0}{2\hbar}\frac{x_{\kappa'\kappa}}{\omega_{\kappa'\kappa}+\omega} \qquad (9.150)$$

واذا عوضنا (9.150) فى (9.146) نجد التابع u :

$$u = \sum_{\kappa'}\left(-\frac{e_0\mathscr{E}_0}{2\hbar}\right)\frac{x_{\kappa'\kappa}}{\omega_{\kappa'\kappa}+\omega}\psi^0_{\kappa'} \qquad (9.151)$$

حيث يعطى العنصر المصفوفى $x_{k'k}$ بالعلاقة :

$$x_{\kappa'\kappa} = \int \psi^{0*}_{\kappa'} x \psi^0_\kappa d^3x \qquad (9.152)$$

واذا بدلنا فى (9.151) ω بـ $-\omega$ نجد أن :

$$v = \sum_{\kappa'}\left(-\frac{e_0\mathscr{E}_0}{2\hbar}\right)\frac{x_{\kappa'\kappa}}{\omega_{\kappa'\kappa}-\omega}\psi^0_{\kappa'} \qquad (9.153)$$

أما التابع الموجى العام $\psi_\kappa(t)$ فيكتب طبقًا لـ (9.139) و (9.143) بالشكل التالى :

$$\psi_\kappa(t) = e^{-i\omega_\kappa t}\left\{\psi^0_\kappa - \frac{e_0\mathscr{E}_0}{\hbar}\sum_{\kappa'}\frac{x_{\kappa'\kappa}\psi^0_{\kappa'}}{\omega^2_{\kappa'\kappa}-\omega^2}[\omega_{\kappa'\kappa}\cos\omega t - i\omega\sin\omega t]\right\} \qquad (9.154)$$

وبحساب التابع الموجى $\psi_\kappa(t)$ للالكترون فى حقل خارجى من السهل حساب متجه استقطاب الوسط $\mathscr{P}$ ، فمثلا طبقا للنظرية الكلاسيكية :

$$\mathscr{P}_x = \mathscr{P} = Np = -Ne_0x$$

حيث N عدد الذرات فى وحدة الحجوم ، ولتعميم هذه العلاقة على الحالة

الكوانتية ينبغى استبدال p بقيمته الوسطى وعندئذ يكون :

$$\mathscr{P} = N\langle p\rangle = -Ne_0 \int \psi_\kappa^*(t)\, x\psi_\kappa(t)\, d^3x \qquad (9.155)$$

وإذا عوضنا عن $\psi_\kappa(t)$ بقيمتها من (9.154) واقتصرنا على الحدود المتناهية فى الصغر من المرتبة الأولى لـ $\mathscr{E}_0$ ، فإننا نجد :

$$\mathscr{P} = \frac{2Ne_0^2}{\hbar} \sum_{\kappa'} \frac{\omega_{\kappa'\kappa} |x_{\kappa'\kappa}|^2}{\omega_{\kappa'\kappa}^2 - \omega^2} \mathscr{E}_0 \cos \omega t \qquad (9.156)$$

وعند استنتاج (9.156) استفدنا من العلاقة التالية :

$$\int \psi_\kappa^{0*} x \psi_\kappa^0 d^3x = \int |\psi_\kappa^0|^2 x d^3x = 0$$

لأن المستكمل تابع فردى . وبمقارنة (9.156) مع (9.134) ، نحصل على علاقة التبدد :

$$\frac{n^2-1}{4\pi} = \frac{2Ne_0^2}{\hbar} \sum_{\kappa'} \frac{\omega_{\kappa'\kappa} |x_{\kappa'\kappa}|^2}{\omega_{\kappa'\kappa}^2 - \omega^2} \qquad (9.157)$$

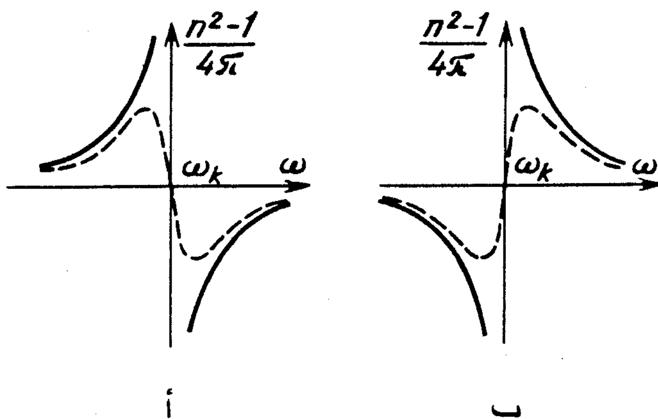
وإذا أدخلنا المتحول الجديد :

$$f_{\kappa'\kappa} = \frac{2m_0}{\hbar} \omega_{\kappa'\kappa} |x_{\kappa'\kappa}|^2 \qquad (9.158)$$

والذى يسمى بقوة الهزاز ، يمكن كتابة (9.157) بالشكل التالى :

$$\frac{n^2-1}{4\pi} = \frac{Ne_0^2}{m_0} \sum_{\kappa'} \frac{f_{\kappa'\kappa}}{\omega_{\kappa'\kappa}^2 - \omega^2} \qquad (9.159)$$

ونلاحظ أنه لو درسنا منذ البداية قوة الاحتكاك الاشعاعى بالطريقة الكوانتية لحصلنا على قيم محددة لـ n^2 من أجل الترددات ω القريبة من $\omega_{k'k}$ لمنطقة التبدد الشاذ كما فى الحالة الكلاسيكية ، انظر الشكل (٩ ـ ٢ ، أ) الخط المتقطع .



الشكل ٩ ـ ٢ . منحنيات التبدد : (أ) التبدد الموجب ($\omega_k = \omega_{k'k}$) (ب) التبـدد السالب ($\omega_k = \omega_{kk'}$) .

ان شكل العلاقة (9.159) يذكرنا بالعلاقة الكلاسيكية ، إلا أن النتائج الكوانتية ، فى الواقع ، تختلف عن الكلاسيكية ، فطبقا للنظرية الكوانتية يكون التبدد الشاذ واقعا فى مجال الترددات الموافقة للانتقالات المسموحة وليس فى مجال التردد الميكانيكى الخاص باهتزاز الالكترون ، كما ينتج من النظريات الكلاسيكية . وهذا الاستنتاج يأتى من العلاقة (9.159) نفسها حيث تلعب قوة الهزاز $f_{k'k}$ دورا كبيرا يتعين بالعنصر المصفوفى $r_{k'k}^2$، انظر العلاقة (9.158) ، الذى يحدد قواعد الانتقاء أى الانتقـالات المسموحة . وقد أكد النتائج الكوانتية هذه العالم روجديستونسكى تجريبيا مستعملا ما يسمى بطريقة المنعطفات أما الاختلاف الأهم بين النتائج الكوانتية والكلاسيكية ، هو أنه طبقا للأولى توجد امكانية حدوث التبدد السالب ، الشكل (٩ ـ ٢ ، ب) ، بجانب التبدد العادى الموجب ، وهو ما ليس له نظير كلاسيكى . وفى الحقيقة إذا حصل تبدد الضوء على الذرات المهيجة فيجب أن نأخذ بعين الاعتبار الحالات التى يكون فيها $E_k > E_{k'}$

ويتحقق بالنسبة لها ما يلى :

$$f_{\kappa'\kappa} \sim \omega_{\kappa'\kappa} = \frac{E_{\kappa'} - E_{\kappa}}{\hbar} < 0$$

وعندئذ تأخذ علاقة التبدد (9.159) الشكل التالى :

$$\frac{n^2 - 1}{4\pi} = -\frac{Ne_0^2}{m_0} \sum_{\kappa'} \frac{|f_{\kappa'\kappa}|}{\omega_{\kappa'\kappa}^2 - \omega^2} \qquad (9.160)$$

أما منحنى التبدد المقابل فهو المنحنى المنقط على الشكل (٩ ـ ٢ ،ب) وقد لاحظ التبدد السالب تجريبيا العالم لادينبورج وهكذا ثبتت صحة الاستنتاج الكوانتى الأخير أيضا . ولنحسب قوة الهزاز $f_{kk'}$ وبالتالى نحسب التبدد فى حالة الهزاز التوافقى ، فإذا لاحظنا أن العناصر المصفوفية التى لا تساوى الصفر ، انظر (9.106) ، هى التالية :

$$x_{\kappa+1,\,\kappa} = \sqrt{\frac{\hbar(k+1)}{2m_0\omega_0}} \qquad x_{\kappa-1,\,\kappa} = \sqrt{\frac{\hbar\kappa}{2m_0\omega_0}} \qquad (9.161)$$

وهى تلك التى تقابل التردد الكوانتى للاشعاع والتى تتطابق مع التردد الميكانيكى للاهتزاز عن طريق «الصدفة»، أى أن :

$$\omega_{\kappa+1,\,\kappa} = \omega_0 \qquad \omega_{\kappa-1,\,\kappa} = -\omega_0 \qquad (9.162)$$

وبعدئذ نجد :

$$f_{\kappa+1,\,\kappa} = (\kappa + 1), \quad f_{\kappa-1,\,\kappa} = -\kappa \qquad (9.163)$$

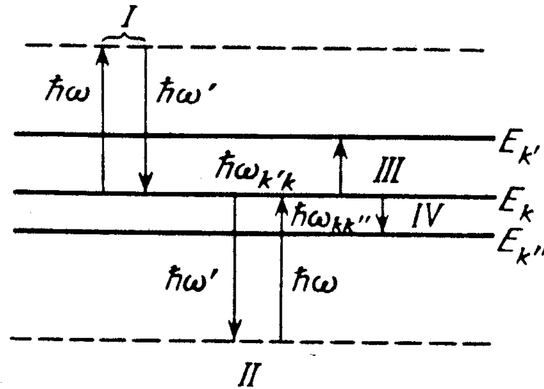
أى أن :

$$\sum_{\kappa'} f_{\kappa'\kappa} = 1 \qquad (9.164)$$

ولهذا تكتب علاقة التبدد (9.159) بالشكل التالى :

$$\frac{n^2 - 1}{4\pi} = \frac{Ne_0^2}{m_0} \frac{\kappa + 1}{\omega_0^2 - \omega^2} - \frac{Ne_0^2}{m_0} \frac{\kappa}{\omega_0^2 - \omega^2} = \frac{Ne_0^2}{m_0} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2} \qquad (9.165)$$

ومنه نستخلص أنه فى هذه الحالة الخاصة تعطى النظريتان الكلاسيكية والكوانتية نفس النتيجة لقرينة الانكسار n ، ولم تلاحظ هنا ظاهرة التبدد السالب ، وسبب ذلك أن مجال التبدد السالب يتطابق مع مجال التبدد الموجب لأن : $|\omega_{k+1,k}|^2 = |\omega_{k-1,k}|^2$ وبالتالى لا يظهر التبدد السالب فى حالة الهزاز التوافقى .



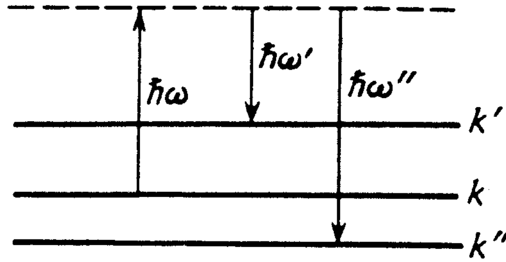
الشكل ٩ ـ ٣ . مخطط الطاقة لتبدد الفوتون ، حيث : $h\omega$ ـ طاقة الفوتون الساقط و $h\omega'$ ـ طاقة الفوتون المتبدد و I و II ـ التبدد المرن للفوتون ($h\omega \neq h\omega_{k'k}$ و $h\omega \neq h\omega_{kk''}$) و III و IV ـ الانتقالان القسريان ($h\omega \sim h\omega_{k'k}$ أو $h\omega_{kk''}$) .

د) التبدد التوزيعى للضوء . لنحلل ظاهرة التبدد من وجهة نظر مخطط الطاقة ولذلك ندرس فوتونا يسقط على ذرة لها سويات $E_{k''} < E_k < E_{k'}$ انظر الشكل ٩ ـ ٣ ، وبفرض أن $\varepsilon = h\omega$ هى طاقة هذا الفوتون . يعتبر تبدد هذا الفوتون ، بصورة عامة ، تأثيرا من الدرجة الثانية ويمكن أن يحدث بأحد الشكلين التاليين :

١ ـ يحدث أولا امتصاص للفوتون الوارد (وعندئذ ينتقل الالكترون ، الواقع فى اللحظة الابتدائية على السوية k ، إلى حالة بينية قد تكون ممنوعة* (I على الشكل ٩ ـ ٣) ثم اصدار الفوتون المتبدد .

* بعبارة أدق قد يختل قانون مصونية الطاقة فى الحالات البينية لكنه يتحقق فى النتيجة النهائية .

٢ - فى البدء تطلق الذرة فوتونا (II على الشكل ٩ - ٣) ثم يحدث امتصاص الفوتون الوارد ، وإذا عاد الالكترون بعد ذلك إلى موضعه السابق ، وطبقا لقانون مصونية الطاقة ، سيساوى تردد (تواتر) الفوتون المتبدد تواتر الفوتون الساقط ω* وقد يحدث أن لاينتقل الالكترون من الحالة البينية إلى السوية البدائية k بل إلى السوية k' الواقعة إلى الأعلى من k أو إلى k'' الواقعة إلى الأسفل من k ، الشكل (٩ - ٤) ، وعندئذ لن يساوى



الشكل ٩ - ٤ . التبدد التوزيعى للضوء ، حيث : $\hbar\omega$ - طاقة الفوتون الساقط و $h\omega'$ و $h\omega''$ - طاقتا الفوتونين المتبددين المقابلين لخطوط ، ستوكس ، وخطوط ، ستوكس ، المضادة .

تواتر الضوء المتبدد (ω' أو ω'') ، تواتر الضوء الوارد فيقال أنه حدث تبدد توزيعى للضوء أو ما يسمى بظاهرة رامان لأن أول من اكتشفها فى السوائل هما العالمان الهنديان رامان وكريشنان ، أما فى الأجسام الصلبة فقد اكتشفها الفيزيائيان السوفيتيان لاندسبيرغ وماندل شتام فى عام ١٩٢٨ . وأن تواتر الفوتون فى ظاهرة رامان يمكن أن يكون أكبر أو أصغر من تواتر الضوء الوارد كما يبدو من الشكل ٩ - ٤ ، ففى الحالة الأولى تقابل الخطوط :

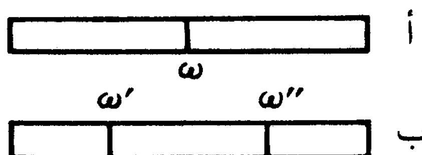
$$\omega' = \omega - \omega_{k'k} < \omega \qquad (9.166)$$

---

* عند حدوث الرنين (التجاوب) $\omega \approx \omega_{kk}$ قد تمتص الفوتونات وقد تتبدد ، أما الكترونات الذرة فتنتقل قسريا ويتحدد احتمال الانتقالات القسرية بواسطة معامل اينشتين B_{kk} (III على الشكل ٩ - ٣) وكذلك يمكن للحقل الخارجى أن يقوى الانتقالات من الأعلى إلى الأسفل ، وعندئذ يظهر اشعاع قسرى بجانب التلقائى يتناسب طرديا مع B_{kk} . (IV على الشكل ٩ - ٣) .

المسماة بخطوط ستوكس (يحدث الانزياح باتجاه الجزء « الأحمر » من الطيف) ، تهيج الذرة لأنها بنتيجة التبدد تبدو فى حالة أعلى للطاقة ، أما فى الحالة الأخرى فيتولد ما يسمى بخطوط ستوكس المضادة (يحدث الانزياح باتجاه الجزء « البنفسجي » من الطيف)

$$\omega'' = \omega + \omega_{\kappa\kappa''} > \omega. \qquad (9.166a)$$



الشكل ٩ ـ ٥ . توضع الترددات الجزيئية على تردد الضوء الساقط : (أ) الخط الطيفى ω باهمال الاهتزازات الجزيئية ؛ (ب) انزياح الخط الطيفى الناتج عن الاهتزازات الجزيئية : $\omega'' = \omega + \omega_{\kappa\kappa''}$ ؛ $\omega' = \omega - \omega_{\kappa'\kappa}$.

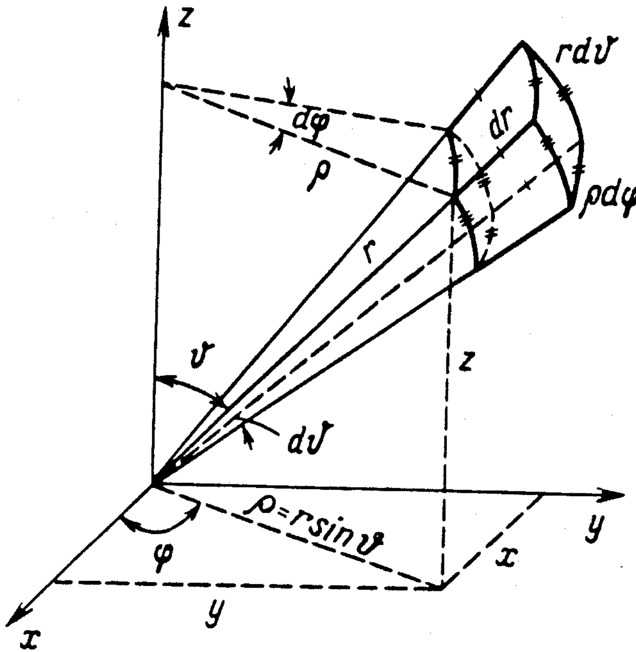
والتى تظهر فقط عندما يتبدد الضوء على الذرات المتهيجة (الشكل ٩ ـ ٥) ويلعب التبدد التوزيعى دورا هاما عند دراسة بنية الجزيئات لأن الأطياف الدورانية والاهتزازية تقع فى أعماق منطقة تحت الحمراء ولهذا يصعب كشفها . وبدراسة التبدد التوزيعى يمكن تحليل الضوء المرئى وطيف الجزيئات بتغيير التواتر نتيجة للتبدد فقط .

البند ١٠ ـ النظرية العامة لحركة الجسيم فى الحقل المركزى المتناظر

تعتبر حركة الجسيم فى الحقل المركزى المتناظر من المسائل الأساسية فى الميكانيكا الكوانتية وعلى أساسها تبنى النظرية الكوانتية لذرة الهيدروجين والذرات متعددة الالكترونات ونظرية التبدد . وخلاصة القول : أن ارتباط التابع الموجى للجسيم بالزوايا الكروية فى الحقل المركزى المتناظر لا يتعلق بشكل التابع الكمونى ولهذا تنطبق نتائج دراسة القسم الزاوى من التابع الموجى (التوابع الكروية) على أى حركة فى الحقل المركزى .

أ) **معادلة شرودينجر فى الاحداثيات المنحنية المتعامدة** . لا تتعلق الطاقة الكامنة $V(r)$ فى الحقل المركزى المتناظر إلا ببعد الجسيم عن نقطة ثابتة تسمى مركز القوى . لنضع مركز الاحداثيات فى مركز القوى ولنأخذ الاحداثيات الكروية r ، ϑ ، φ المرتبطة بالاحداثيات الديكارتية x ، y ، z (الشكل ١٠ ـ ١) بالعلاقات :

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi$$
$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi, \quad z = r \cos \vartheta$$
$$(0 \leqslant r < \infty, \ \ 0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi, \ 0 \leqslant \vartheta \leqslant \pi) \qquad (10.1)$$



الشكل ١٠ ـ ١ . الجملة المتعامدة فى الاحداثيات الكروية .

يتم حل معادلة شرودينجر لجسيم يتحرك فى حقل $V(r)$ مركزى متناظر ، فى الاحداثيات الكروية ، بطريقة فصل المتغيرات وفى الحالة الخاصة الهامة

عندما يكون الحقل كولونيا* لوصف التفاعل بين نـواة شحنتهـا Ze_0 والكترون شحنته $e = -e_0$ يكون

$$V(r) = -\frac{Ze_0^2}{r} \qquad (10.2)$$

ويمكن حل هذه المسألة بطريقة فصل المتغيرات (المتحولات) أيضا فى الاحداثيات القطعية التالية : ξ ، η ، φ حيث :

$$x = \sqrt{\xi\eta}\cos\varphi, \quad y = \sqrt{\xi\eta}\sin\varphi, \quad z = {}^1/_2(\xi - \eta)$$
$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = {}^1/_2(\xi + \eta) \qquad (10.3)$$

أى أن

$$\xi = r + z, \quad \eta = r - z, \quad \varphi = \operatorname{arc\,tg}\frac{y}{x}$$
$$(0 \leqslant \xi < \infty, \; 0 \leqslant \eta < \infty, \; 0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi) \qquad (10.4)$$

ولندرس أولا الشكل العام لمعادلة شرودينجر فى جملة احداثيات متعامدة اختيارية (q_1 و q_2 و q_3) عندما يكون الاتجاه المتعلق بتغير عنصرى لأحد الاحداثيات متعامدا مع الاتجاهين الآخرين للاحداثيين الباقيين ، أما المتجه ـ القطرى r فيكون تابعا لهذه الاحداثيات أى (q_1, q_2, q_3) r وإذا كتبنا المتجه القطرى فى الاحداثيات الديكارتية :

$$\mathbf{r} = j_1 x + j_2 y + j_3 z \qquad (10.5)$$

واعتبرنا أن الاتجاهات j_n ($n = 1, 2, 3$) تبقى ثابتة فمن السهل الحصول على العلاقة التالية :

$$\frac{d\mathbf{r}}{dq_j} = j_1\frac{\partial x}{\partial q_j} + j_2\frac{\partial y}{\partial q_j} + j_3\frac{\partial z}{\partial q_j} \qquad (10.6)$$

أى أن :

$$\left|\frac{\partial r}{\partial q_j}\right| = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial q_j}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial q_j}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial q_j}\right)^2} = H_j \qquad (10.7)$$

وعندئذ نرى أن تفاضل الطول العنصرى l_j يساوى :

$$dl_j = H_j\, dq_j \qquad (10.8)$$

أى أن مركبة التدرج على الاتجاه l_j تكون :

$$\frac{\partial \psi}{\partial l_j} = \frac{\partial \psi}{H_j\, \partial q_j} \qquad (10.9)$$

وعندئذ نكتب عنصر الحجم فى جملة الاحداثيات المتعامدة بالشكل التالى :

$$d^3x = dl_1\, dl_2\, dl_3 = H_1 H_2 H_3\, dq_1\, dq_2\, dq_3 \qquad (10.10)$$

وللحصول على اللابلاسيان نكتب عبارة تباعد متجه ما B فى الاحداثيات q_1, q_2, q_3

$$\operatorname{div} \boldsymbol{B} = \lim_{S \to 0} \frac{\oint (\boldsymbol{B}\, d\boldsymbol{S})}{d^3x} =$$

$$= \frac{\frac{\partial}{\partial q_1} B_1\, dq_1\, dS_1 + \frac{\partial}{\partial q_2} B_2\, dq_2\, dS_2 + \frac{\partial}{\partial q_3} B_3\, dq_3\, dS_3}{H_1 H_2 H_3\, dq_1\, dq_2\, dq_3} \qquad (10.11)$$

حيث :

$$\begin{aligned} dS_1 &= dl_2\, dl_3 = H_2 H_3\, dq_2\, dq_3 \\ dS_2 &= dl_3\, dl_1 = H_3 H_1\, dq_3\, dq_1 \\ dS_3 &= dl_1\, dl_2 = H_1 H_2\, dq_1\, dq_2 \end{aligned} \qquad (10.12)$$

وبعد أن نفترض فى (10.11) أن $B = \operatorname{grad} \psi$ نجد أن مؤثر لابلاس :

$$\nabla^2 \psi = \operatorname{div} \operatorname{grad} \psi \qquad (10.13)$$

يكتب بالشكل التالى :

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{H_1H_2H_3}\left\{\frac{\partial}{\partial q_1}\frac{H_2H_3}{H_1}\frac{\partial\psi}{\partial q_1} + \frac{\partial}{\partial q_2}\frac{H_3H_1}{H_2}\frac{\partial\psi}{\partial q_2} + \frac{\partial}{\partial q_3}\frac{H_1H_2}{H_3}\frac{\partial\psi}{\partial q_3}\right\} \quad (10.14)$$

وعندما نأخذ الاحداثيات الديكارتية $q_1 = x, q_2 = y, q_3 = z$ ، التى تعطى $H_1 = H_2 = H_3 = 1$ ، يكون :

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

وفى الاحداثيات الكروية ، انظر الشكل ١٠ ـ ١ ، حيث يكون $q_1 = r$ و $q_2 = \vartheta$ و $q_3 = \varphi$ نجد طبقا لـ (10.1) و (10.8) أن :

$$H_r = 1, \quad H_\vartheta = r, \quad H_\varphi = r\sin\vartheta$$

ومن الشكل نفسه نلاحظ أن اتجاهات تزايدات الاحداثيات متعامدة مثنى مثنى أى أن المجموعة التالية :

$$dl_1 = H_1\,dr, \quad dl_2 = H_2\,d\vartheta, \quad dl_3 = H_3\,d\varphi$$

تكون متعامدة . وعلى أساس ما سبق نحسب عناصر الحجم واللابلاسيان فى الاحداثيات الكروية :

$$d^3x = r^2\,dr\sin\vartheta\,d\vartheta\,d\varphi$$

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\vartheta,\varphi}^2 =$$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \quad (10.15)$$

أما فى الاحداثيات القطعية (المتعامدة) :

$$q_1 = \xi, \quad q_2 = \eta, \quad q_3 = \varphi$$

$$H_\xi = \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{\eta}{\xi}}, \quad H_\eta = \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{\xi}{\eta}}, \quad H_\varphi = \sqrt{\xi\eta}$$

فنجد أن :

$$d^3x = \frac{1}{4}(\xi + \eta)\,d\xi\,d\eta\,d\varphi,$$

$$\nabla^2 = \nabla_{\xi,\eta}^2 + \nabla_\varphi^2 = \frac{4}{\xi + \eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right] + \frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \quad (10.16)$$

ب) التوابع الكروية . لنحل الآن معادلة شرودينجر التالية :

$$\nabla^2\psi + k^2(r)\,\psi = 0 \qquad (10.17)$$

فى الاحداثيات الكروية ، بعد أن نفترض فى (10.17) أن :

$$k^2(r) = \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - V(r)\right) \qquad (10.18)$$

أما اللابلاسيان فهو معرف بالعلاقة (10.15) ، وعليه يجب حل معادلة شرودينجر بطريقة فصل المتحولات ، فنفرض أن :

$$\psi = R(r)\,Y(\vartheta, \varphi) \qquad (10.19)$$

ونضرب المعادلة الأساسية بـ$\left(\frac{r^2}{RY}\right)$ فنجد أن :

$$\frac{r^2\nabla_r^2 R}{R} + r^2k^2 = -\frac{\nabla^2_{\vartheta,\varphi}Y}{Y} \qquad (10.20)$$

وبما أن الطرف الأيسر يتعلق فقط بـ r والأيمن بـ ϑ،φ فلا يمكن أن تتحقق المساواة السابقة إلا عندما يساوى كل من الطرفين مقدارا معينا λ يسمى بثابت الفصل . وهكذا نحصل على المعادلتين المقابلتين لكل من القسمين القطرى والزاوى التاليتين :

$$\nabla_r^2 R + \left(k^2 - \frac{\lambda}{r^2}\right) R = 0 \qquad (10.21)$$

$$\nabla^2_{\vartheta,\varphi}Y + \lambda Y = 0 \qquad (10.22)$$

ومن المهم أن المعادلة لا تحتوى على r ولا تتعلق بشكل التابع الكمونى V ولهذا ينطبق حلها على كل الحركات فى أى حقل مركزى ، كما برهنا ذلك فى بداية هذا البند . لنفرض الآن أن :

$$Y = \Theta(\vartheta)\,\Phi(\varphi) \qquad (10.23)$$

ولنفصل التابع الكروى $Y(\vartheta,\varphi)$ بالزاويتين ϑ و φ فنجد لكل من التابعين $\Theta(\vartheta)$ و$\Phi(\varphi)$ المعادلتين التاليتين :

$$\nabla_\vartheta^2\Theta + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\right)\Theta = 0 \qquad (10.24)$$

$$\nabla_\varphi^2\Phi + m^2\Phi = 0 \qquad (10.25)$$

حيث m^2 ـ ثابت الفصل ، مع العلم أننا رمزنا بـ ∇^2_ϑ و ∇^2_φ للمقادير :

$$\nabla_\vartheta^2 = \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{d}{d\vartheta}\right) \qquad (10.26)$$

$$\nabla_\varphi^2 = \frac{d^2}{d\varphi^2} \qquad (10.27)$$

واستبدلنا المشتقات الجزئية بمشتقات كلية باعتبار أن كلا من التابعين Θ و Φ يتعلق بمتحول واحد . وهكذا نحصل على المعادلات الثلاث : (10.21) و (10.24) و (10.25) لحساب القيم الخاصة للطاقة E_i والتوابع الخاصة المقابلة لها ψ_i ، وإذا كانت المعادلة الأخيرة تحوى على وسيط واحد فإن الأولى والثانية تحتوى وسيطين فقط (انظر فيما بعد المعادلة (10.40) . وبما أنه يمكن حساب القيم الخاصة لوسيط واحد عند حل معادلة واحدة فيجب أن نبدأ بحل المسألة ككل بحل المعادلة (10.25) ومن ثم بمعرفة m^2 ننتقل إلى حل المعادلة (10.24) وأخيرا نحل المعادلة (10.21) لحساب التابع القطرى ، أما لحساب ثابت المعايرة فيمكن استخدام العلاقة :

$$\int \psi^*\psi d^3x = \int_0^\infty R^*Rr^2\,dr \int_0^\pi \Theta^*\Theta \sin\vartheta\, d\vartheta \int_0^{2\pi} \Phi^*\Phi\, d\varphi$$

ومنها نلاحظ امكانية اجراء عملية المعايرة لكل من التوابع السابقة على حدة :

$$\int_0^\infty R^*Rr^2\,dr = 1 \qquad (10.28)$$

$$\int_0^\pi \Theta^*\Theta \sin\vartheta\, d\vartheta = 1 \qquad (10.29)$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*\Phi\, d\varphi = 1 \qquad (10.30)$$

ومن الممكن التعبير عن التابع السمتى ، انظر (10.25) ، اما بالشكل التالى :

$$\Phi = Ce^{im\varphi} \tag{10.31}$$

أو :

$$\Phi = A\cos(m\varphi + \varphi_0) \tag{10.32}$$

ولكل من هذين الحلين تفسير فيزيائى مختلف ، فبينما يمثل الأول (10.31) موجة تتحرك على محيط الدائرة توافق مثلا دوران الالكترون المنتظم ، نرى أن الحل الثانى (10.32) يمثل موجة مستقرة توافق مثلا اهتزاز الالكترون على قوس معين . ولكى يصف التابع Φ دوران الالكترون حول النواة ينبغى اختيار الحل بشكل أمواج متحركة (10.31) . وبما أن الحل الثانى متناسب مع $e^{-im\varphi}$. لذا يمكن الحصول عليه بتبديل m بـ $-m$ ولهذا نستطيع حتى فى الحالة العامة ، اختيار الحل بالشكل التالى :

$$\Phi = Ce^{im\varphi} \tag{10.33}$$

مع العلم أن m يمكن أن تأخذ قيما موجبة وسالبة . فإذا اعتبرنا أن التابع $\Phi(\varphi)$ وحيد القيمة فينبغى أن نطبق عليه شرط الدورية التالى :

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \tag{10.34}$$

ومنه نجد أن :

$$e^{2i\pi m} = 1$$

وهكذا نرى أن المقدار m المسمى بالعدد الكوانتى المغناطيسى يمكن أن يأخذ القيم التالية :

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots \tag{10.35}$$

ومن شرط المعايرة (10.30) نجد أن $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. ومن السهل البرهان بالحساب المباشر أن التوابع :

$$\Phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \qquad (10.36)$$

تحقق شرط التعامد والمعايرة

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m'}^{*} \Phi_m \, d\varphi = \delta_{mm'}$$

وبما أن القيم الخاصة m أصبحت معروفة وكذلك التابع الموجى المتعلق بالزاوية السمتية φ فيمكن البدء بحل المعادلة (10.24) ، وبادخال المتغير الجديد :

$$x = \cos\theta \qquad (10.37)$$

وبالرمز لعملية الاشتقاق بفتحة ، فإننا نحصل بدلا عن (10.24) على المعادلة :

$$[(1-x^2)\,\Theta']' + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta = 0 \qquad (10.38)$$

وبسهولة نرى أن لهذه المعادلة نقطتين شاذتين عندما $x = \pm 1$ ، ينتهى فيهما أحد العوامل إلى اللانهاية ، ولتجنب هذا التباعد سنبحث عن الحل Θ بالشكل التالى :

$$\Theta = (1-x^2)^{s/2}\, u \qquad (10.39)$$

وإذا عوضنا (10.39) فى (10.38) واختصرنا $(1-x^2)^{s/2}$ من المساواة الناتجة نجد أن :

$$(1-x^2)\,u'' - 2x\,(s+1)\,u' + \left[\lambda - s^2 - s + \frac{s^2-m^2}{1-x^2}\right]u = 0 \qquad (10.40)$$

ونستطيع أن نتجنب الشذوذ فى الحد الأخير إذا فرضنا :

$$s = \pm |m|$$

ويحقق الحلان المقابلان لقيمتى s المعادلة التفاضلية نفسها طالما أن المعادلة

الأساسية (10.38) تتعلق بـ m^2 فقط ، وبالتالى يمكن لهذين الحلين أن يختلفا بمضروب ثابت فقط أى أن :

$$\Theta(|m|) = A\Theta(-|m|) \qquad (10.41)$$

وباعتبار صحة العلاقة الأخيرة ، سنبحث عن حل (10.40) عندما

$$s = m \geqslant 0 \qquad (10.42)$$

وبحكم (10.41) يتعمم هذا الحل آليا على قيم m السالبة ، وطبقا للشرط (10.42) تأخذ المعادلة (10.40) الشكل التالى :

$$(1 - x^2)\, u'' - 2x\,(m + 1)\, u' + (\lambda - m\,(m + 1))\, u = 0 \qquad (10.43)$$

وبما أنه ليس للمعادلة الأخيرة أى شذوذ فيمكن تمثيل حلها بشكل سلسلة :

$$u = \sum_{\kappa=0} a_\kappa x^\kappa \qquad (10.44)$$

وعند التعويض فى (10.43) نجد أن

$$\sum_{\kappa=0} \{\kappa\,(\kappa - 1)\, a_\kappa x^{\kappa-2} + [\lambda - (\kappa + m)\,(\kappa + m + 1)]\, a_\kappa x^\kappa\} = 0$$

وبتجميع الحدود التى لها نفس الأس نحصل على المساواة التالية :

$$\sum_{\kappa=0} \{(\kappa + 2)\,(\kappa + 1)\, a_{\kappa+2} + [\lambda - (\kappa + m)\,(\kappa + m + 1)]\, a_\kappa\}\, x^\kappa = 0.$$

ومنها نجد العلاقة التكرارية :

$$(\kappa + 2)\,(\kappa + 1)\, a_{\kappa+2} = -\,[\lambda - (\kappa + m)\,(\kappa + m + 1)]\, a_\kappa \qquad (10.45)$$

التى تعطى كل عوامل السلسلة (10.44) . وبما أن العوامل a_k ترتبط فقط بالعوامل a_{k+2} فالتابع u سيكون إما زوجيا أو فرديا حسب فردية أو زوجية الحد الأعلى فى السلسلة ، فإذا اشترطنا أن تكون السلسلة (10.44) محدودة بحد أعظمى ترتيبه $k = q$ ، أى أن يكون كثير حدود من المرتبة q ، فيجب أن يتحقق الشرط

$$a_{q+2}=0, \quad a_q \neq 0$$

ومن هنا وطبقا لـ (10.45) نحصل على :

$$\lambda=(q+m)(q+m+1) \tag{10.46}$$

حيث :

$$q=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \ldots \tag{10.47}$$

أى أنها تساوى تلك الدرجة التى قطعنا السلسلة عندها . وبادخال العدد الكوانتى المدارى l :

$$l=q+m \tag{10.48}$$

نرى أنه يأخذ القيم التالية :

$$l=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \ldots \tag{10.49}$$

لأن q و m تأخذان قيما موجبة وصحيحة فقط ، وكذلك نلاحظ من (10.48) أن :

$$l \geqslant m \tag{10.50}$$

وإذا اعتبرنا صحة (10.48) و (10.46) نرى أن :

$$\lambda=l(l+1) \tag{10.51}$$

وأن المعادلة (10.40) تصبح :

$$(1-x^2)u''-2x(m+1)u'+[l(l+1)-m(m+1)]u=0 \tag{10.52}$$

حيث :

$$u=a_{l-m}x^{l-m}+a_{l-m-2}x^{l-m-2}+\ldots+\begin{cases} a_0 \\ a_1 x \end{cases} \tag{10.53}$$

ولن نعبر عن العوامل a_k بدلالة a_{k+2} بواسطة العلاقة التكرارية (10.45) بل سنكتب مباشرة الحل بشكل مغلق ، ولهذا نأخذ التابع :

$$v=(x^2-1)^l \tag{10.54}$$

المحقق للمعادلة :

$$(1 - x^2) v' + 2xlv = 0 \quad (10.55)$$

والتى من السهل التحقق منها بأخذ المشتق الأول لـ v بالنسبة إلى x وبتفاضل (10.55) حسب دستور ليبنتز $(l + m + 1)$ مرة ، انظر (7.34) ، بعد أن نفترض أن :

$$v^{(l+m)} \equiv \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - 1)^l = u_1 \quad (10.56)$$

نجد المعادلة التى يحققها التابع u_1 أى أن :

$$(1 - x^2) u_1'' - 2x (m + 1) u_1' + [l (l + 1) - m (m + 1)] u_1 = 0 \quad (10.57)$$

والتى تتطابق مع المعادلة (10.52) التى يحققها التابع u ، وبالتالى يجب أن يتناسب التابعان u_1 و u مع بعضهما ، أى أن :

$$u = \text{const}\, u_1 \quad (10.58)$$

وبما أننا لم نعين ثابت المعايرة للتابع Θ حتى الآن فيمكن اعتبار أن الثابت فى (10.58) يساوى $\frac{1}{2^l l!}$ وذلك لكى يتحول الأخير عندما $m = 0$ إلى كثير حدود ليجاندر التالى :

$$P_l (x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l (x^2 - 1)^l}{dx^l} \quad (10.59)$$

وهكذا يكون

$$u = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - 1)^l$$

ومنه وبواسطة (10.39) نحسب التابع Θ فنجد أن :

$$\Theta_l^m = C_l^m P_l^m (x) \quad (10.60)$$

حيث P_l^m هو كثير حدود ليجاندر الموحد المعرف بالعلاقة التالية :

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} \left[\frac{(x^2-1)^l}{2^l l!} \right] \qquad (10.61)$$

أما C_l^m فهو مضروب المعايرة .

وسيكون الحل الثانى لـ (10.38) عندما $\lambda = l(l+1)$ متناسبا مع التابع :

$$Q_l^m = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} Q_l(x) \qquad (10.61a)$$

حيث $Q_l(x)$ هو تابع ليجاندر من النوع الثانى يعطى بالعلاقة

$$Q_l(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \frac{P_l(y)\,dy}{x-y} = \frac{1}{2} P_l(x) \ln \frac{1+x}{1-x} - W_{l-1}(x) \qquad (10.61b)$$

و $W_{l-1}(x)$ هو كثير حدود درجته $l-1$ (مع تحقق الشرط $W_{-1}(x) = 0$) وليس فيه أى تباعد . وبما أن الحد الأول فى الطرف الأيمن من المساواة (10.61a) يباعد التابع $Q_l^m(x)$ فى النقطتين الشاذتين ($x = \pm 1$) فيجب اهمال هذا الحل كحل لمعادلة شرودينجر .

وبالرغم من أننا حصلنا على العبارة (10.61) من أجل قيم m الموجبة إلا أنه يمكن تعميمها بصورة آلية على قيم m السالبة حسب العلاقة المعروفة :

$$P_l^m(x) = (-1)^m \frac{(l+m)!}{(l-m)!} P_l^{-m}(x) \qquad (10.62)$$

وابرهان هذه العلاقة نكتبها بملاحظة (10.61) بالشكل التالى :

$$(l-|m|)!\,(x^2-1)^{|m|} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2-1)^l = (l+|m|)! \frac{d^{l-|m|}}{dx^{l-|m|}} (x^2-1)^l \qquad (10.63)$$

وبما أن P_l^m ترتبط بـ P_l^{-m} بشكل خطى ، انظر (10.41) إذن يكفى البرهان على أن المعاملين أمام أعلى أس لـ x متطابقان فى كل من طرفى (10.63) أى أن :

$$(l-|m|)!\, x^{2|m|} \frac{d^{l+|m|} x^{2l}}{dx^{l+|m|}} = (l+|m|)! \frac{d^{l-|m|}}{dx^{l-|m|}} x^{2l}$$

ويسهل التحقق من ذلك إذا لاحظنا أن :

$$\frac{d^{\kappa}x^{n}}{dx^{\kappa}}=\begin{cases}\frac{n!}{(n-\kappa)!}x^{n-\kappa}, & \kappa\leqslant n\\ 0, & \kappa>n\end{cases}$$

ومن (10.61) و (10.62) يمكن معرفة مجال تغير العدد الكوانتى m بشكل نهائى :

$$m=0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots,\ \pm l \qquad (10.64)$$

وهذا ينتج من تلك الحقيقة التى تؤكد انعدام P_l^m عندما $l < |m|$ ، ويمكن حساب المعامل C_l^m من شرط المعايرة :

$$\int_0^{\pi}\Theta_l^m\Theta_l^m \sin\vartheta\, d\vartheta=\int_{-1}^{1}\Theta_l^m(x)\,\Theta_l^m(x)\,dx=1$$

وذلك بتبديل الحل (10.60) فيها وملاحظة (10.62) أى ان :

$$\frac{(-1)^m(l+m)!}{(2^l l!)^2(l-m)!}|C_l^m|^2\int_{-1}^{1}\left[\frac{d^{l-m}}{dx^{l-m}}(x^2-1)^l\right]\left[\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2-1)^l\right]dx=1$$

وبتبديل عملية الاشتقاق من الحد الثانى على الحد الأول ($l+m$) مرة واجراء التكامل الأخير ($l+m$) مرة بالتجزئة نجد أن :

$$\frac{1}{(2^l l!)^2}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}|C_l^m|^2\int_{-1}^{+1}(1-x^2)^l\frac{d^{2l}}{dx^{2l}}(x^2-1)^l\,dx=1$$

وإذا اعتبرنا المساواة التالية :

$$\frac{d^{2l}}{dx^{2l}}x^n=\begin{cases}2l! & (n=2l),\\ 0 & (n<2l).\end{cases}$$

صحيحة وأخذنا بنظر الاعتبار العلاقة التالية :

$$\int_{-1}^{+1}(1-x^2)^l\,dx=\frac{(l!)^2\,2^{2l+1}}{(2l+1)!}$$

نجد أن :

$$C_l^m = \sqrt{\frac{(2l+1)\,(l-m)!}{2\,(l+m)!}} \qquad (10.65)$$

وعندئذ يكون :

$$\Theta_l^m = \sqrt{\frac{(2l+1)\,(l-m)!}{2\,(l+m)!}}\, P_l^m(x) \qquad (10.66)$$

أما التوابع الكروية $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ المحققة للمعادلة (10.22) فتكتب طبقا لـ (10.23) و (10.36) و (10.66) بالشكل التالى :

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \Theta_l^m \Phi_m = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\, P_l^m(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi} \qquad (10.67)$$

بينما يكتب شرط التعامد والمعايرة للتوابع الكروية بالشكل :

$$\oint (Y_{l'}^{m'})^* \, Y_l^m \, d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \qquad (10.68)$$

ولبرهان الشرط (10.68) ينبغى تبديل التوابع الكروية بقيمتها من (10.67) وعندئذ من السهل أن نحصل عند الاستكمال بالنسبة لـ φ على العلاقة التالية :

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi}\, d\varphi = \delta_{mm'}$$

وينبغى أن نجعل $m' = m$ عند التكامل بالنسبة لـ ϑ فى كثير حدود ليجاندر وعندئذ يمكن أن نضع ، حتى فى الحالة العامة ، أن $l < l'$. أما عندما $l = l'$ فقد درسناها منذ قليل عند حساب ثابت المعايرة وباتباع أسلوب مشابه عندما $l < l'$ ، من السهل البرهان أن تبديل المشتقات من التابع ذى الوسيط $l + m$ إلى التابع ذى الوسيط $l' - m$ يؤدى إلى انعدام التكامل (10.68) . و عليه نستطيع كتابة التابع الكروى (10.67) بواسطة العلاقة (10.62) بالشكل التالى :

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = a_m \sqrt{\frac{(2l+1)\,(l-|m|)!}{4\pi\,(l+|m|)!}}\, P_l^{|m|}(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi} \qquad (10.67a)$$

حيث :

$$a_m = \begin{cases} 1 & , \quad m \geqslant 0 \\ (-1)^m & , \quad m < 0 \end{cases} \qquad (10.67b)$$

مع ملاحظة أن كثيرا من المؤلفين يعتبرون $a_m = 1$. وفى هذا المجال نقول أنه عندما نحصر المسألة بحساب التوابع الكروية المحققة لشرط التعامد والمعايرة (10.68) وحده ، يكون كلا الحلين متطابقين تماما طالما أن $a'_m = 1$. أما عندما يكون من الضرورى استخدام العلاقة التكرارية بين التوابع الكروية المختلفة بالعدد الكوانتى m ، انظر العلاقتين (11.17) و (11.18) ، فمثلا عند حساب قواعد الانتقاء (الاصطفاء) للدوّارة أو فى النظرية النسبية للقوى المركزية فينبغى اعتبار قيمة a_m كما وردت فى (10.67b) . ولنحسب أخيرا زوجية التابع الكروى أى سلوكيته عند عكس الفراغ ، الذى ينتج عند تغيير الاحداثيات الديكارتية الثلاثة . أى عندما يحدث التحويل التالى :

$$\varphi \rightarrow \pi + \varphi, \quad \theta \rightarrow \pi - \theta \; ، \; \text{و} \qquad \cos\theta \rightarrow -\cos\theta$$

كما ويتبين من (10.61) فى هذه الحالة أن :

$$P_l^m(x) \rightarrow P_l^m(-x) = (-1)^{l+m} P_l^m(x)$$

$$e^{im\varphi} \rightarrow e^{im\varphi} e^{i\pi m} = (-1)^m e^{im\varphi}$$

ولهذا سيتغير التابع الكروى عند عكس الفراغ حسب القانون التالى :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} C_l^m P_l^m(x) e^{im\varphi} \rightarrow (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi)$$

ومن هنا نرى أن العدد الكوانتى المدارى l يميز زوجية التابع الكروى . فمن أجل l الزوجية سيكون التابع الكروى زوجيا (لا يغير اشارته عند تغيير الفراغ) وسيكون فرديا عندما يكون l عددا فرديا (أى يغير اشارته إلى عكسها عند عكس الفراغ) .

جـ) المعنى الفيزيائى للعددين الكوانتيين m و l وعزم كمية الحركة .

لقد رأينا سابقا أن العدد الكوانتى l يرتبط بالقيمة الخاصة $\lambda = l(l+1)$ للمؤثر $\nabla^2_{\vartheta,\varphi}$ ، انظر (10.22) و(10.51)، الذى يدخل فى العبارة الكوانتية التأثيرية لتابع هاملتون (أى فى الهاملتونيان) :

$$H = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_0} + V(r) = -\frac{\hbar^2\nabla_r^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2\nabla^2_{\vartheta,\varphi}}{2m_0 r^2} + V(r) \qquad (10.69)$$

فإذا قارنا الهاملتونيان الأخير مع العبارة الكلاسيكية لتابع هاملتون

$$H = \frac{m_0 v^2}{2} + V(r) = \frac{p_r^2}{2m_0} + \frac{L^2}{2m_0 r^2} + V(r) \qquad (10.70)$$

حيث $p_r = m_0\dot{r}$ ، $L = m_0 r^2\dot{\varphi}$ نجد أن المؤثر $\hbar^2\nabla^2_{\vartheta,\varphi}$ يقابل مربع عزم الاندفاع L^2 فى الحالة الكلاسيكية ، أما المؤثر $\hbar^2\nabla_r^2$ فيقابل مربع الاندفاع القطرى p_r^2 . ولندرس بالتفصيل هذا التقابل ، من المعلوم فى الميكانيكا الكلاسيكية أن عزم الاندفاع L يعرف بالعلاقة التالية :

$$L = [rp] \qquad (10.71)$$

ونشير بالمناسبة أنه إذا كان $M = [rF]$ عزم القوى الخارجية F فإن تغير L مع الزمن سيكون خاضعا للقانون التالى :

$$\frac{dL}{dt} = M \qquad (10.72)$$

وعندما تكون القوى مركزية ($F \| r$) ينعدم عزم القوى الخارجية M وبالتالى نجد أن :

$$L = \text{const}$$

ويعرف هذا القانون فى الميكانيكا الكلاسيكية بقانون مصونية كمية الحركة ، فيما يسمى فى مسألة كبلر بقانون مصونية السرعة القطّاعية . ولتعميم الصيغة التقليدية لكمية الحركة على الحالة الكوانتية يجب أن تتغير كمية

الحركة التقليدية فى العبارة (10.71) بمؤثر $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$ وعندئذ سيكون :

$$\mathbf{L} = [r\mathbf{p}] = \frac{\hbar}{i}[r\nabla] \qquad (10.73)$$

أو :

$$\begin{aligned} L_x &= y p_z - z p_y \\ L_y &= z p_x - x p_z \\ L_z &= x p_y - y p_x \end{aligned} \qquad (10.74)$$

ولنلاحظ قبل كل شيء أن مؤثرات مركبات كمية الحركة L_x و L_y و L_z لا تتبادل فيما بينها ، وفى الحقيقة إذا حسبنا مثلا العلاقة التبادلية بين L_x و L_y نجد أن :

$$L_x L_y - L_y L_x = (y p_z - z p_y)(z p_x - x p_z) - (z p_x - x p_z)(y p_z - z p_y)$$

وإذا استخدمنا العلاقات التبادلية بين الاندفاع (كمية الحركة) والاحداثى المقابل ، انظر (6.30a) نجد أن :

$$L_x L_y - L_y L_x = -i\hbar (y p_x - x p_y) = i\hbar L_z \qquad (10.75)$$

وبطريقة مشابهة يمكن البرهان أن :

$$\begin{aligned} L_y L_z - L_z L_y &= i\hbar L_x \\ L_z L_x - L_x L_z &= i\hbar L_y \end{aligned} \qquad (10.76)$$

ولحساب مؤثر مربع عزم الاندفاع فى الاحداثيات الكروية :

$$\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \qquad (10.77)$$

نحسب أولا المركبات L_x و L_y و L_z فى الاحداثيات الكروية ، فإذا اعتبرنا العلاقة (10.1) بين الاحداثيات الكروية والديكارتية نجد أن :

$$\begin{aligned} \frac{\partial\psi}{\partial\theta} &= \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\theta} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\theta} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\theta} = \\ &= r\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial\psi}{\partial x} + r\cos\theta\sin\varphi\frac{\partial\psi}{\partial y} - r\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial z} = \\ &= \frac{xz}{\rho}\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{yz}{\rho}\frac{\partial\psi}{\partial y} - \rho\frac{\partial\psi}{\partial z} \end{aligned} \qquad (10.78)$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}=\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\varphi}+\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\varphi}+\frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\varphi}=$$

$$=-r\sin\vartheta\sin\varphi\frac{\partial\psi}{\partial x}+r\sin\vartheta\cos\varphi\frac{\partial\psi}{\partial y}=-y\frac{\partial\psi}{\partial x}+x\frac{\partial\psi}{\partial y} \quad (10.79)$$

وإذا ضربنا (10.78) بـ $\frac{x}{\rho}$ و (10.79) بـ $\left(-\frac{yz}{\rho^2}\right)$ ولاحظنا أن $\rho^2 = x^2 + y^2$ نجد بجمع العلاقتين المذكورتين ما يلي :

$$z\frac{\partial\psi}{\partial x}-x\frac{\partial\psi}{\partial z}=\cos\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}-\sin\varphi\,\mathrm{ctg}\,\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} \quad (10.80)$$

وإذا ضربنا بعدئذ المساوتين (10.78) و (10.79) بـ $\left(-\frac{y}{\rho}\right)$ و $\left(-\frac{xz}{\rho^2}\right)$ على الترتيب نحصل بطريقة مشابهة على أن :

$$y\frac{\partial\psi}{\partial z}-z\frac{\partial\psi}{\partial y}=-\left\{\sin\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}+\cos\varphi\,\mathrm{ctg}\,\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right\} \quad (10.81)$$

ومنه وباعتبار المساوتين (10.79) و (10.74) نجد أن :

$$L_x=-\frac{\hbar}{i}\left\{\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}+\cos\varphi\,\mathrm{ctg}\,\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\} \quad (10.82)$$

$$L_y=\frac{\hbar}{i}\left\{\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}-\sin\varphi\,\mathrm{ctg}\,\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\} \quad (10.83)$$

$$L_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad (10.84)$$

ثم إذا فرضنا $\mu = \cos\vartheta$ يمكن كتابة (10.82) و (10.83) بالشكل التالى :

$$L_x\pm iL_y=\hbar e^{\pm i\varphi}\left(i\frac{\mu}{\sqrt{1-\mu^2}}\frac{\partial}{\partial\varphi}\mp\sqrt{1-\mu^2}\frac{\partial}{\partial\mu}\right) \quad (10.85)$$

ولحساب تأثير هذين المؤثرين على التوابع نستفيد من امكانية التعبير عن التابع الكروى بأحد شكليه أى إما بالشكل (10.67a) أو بالشكل التالى :

$$Y_l^m=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}\,P_l^{-m}(\cos\vartheta)\,e^{im\varphi} \quad (10.86)$$

وإذا أثرنا مباشرة على التابع الكروى بالمؤثر L_z نجد أن :

$$L_zY_l^m=\hbar mY_l^m \quad (10.87)$$

ومن هنا ينتج أن العدد الكوانتى m يميز مسقط عزم الاندفاع (كمية

الحركة) على المحور z ولحساب تأثير المؤثر $L_x + iL_y$ على التابع الكروى نعوض عبارة Y_l^m من (10.67) ، وعند التأثير $L_x - iL_y$ نعوض عن من (10.86) وبعدئذ ينتج من المساواة التالية :

$$e^{\pm i\varphi}\left(i\frac{\mu}{\sqrt{1-\mu^2}}\frac{\partial}{\partial\varphi} \mp \sqrt{1-\mu^2}\frac{\partial}{\partial\mu}\right)e^{im\varphi}(1-\mu^2)^{\pm m/2}f(\mu) =$$

$$= \mp e^{i\varphi(m\pm 1)}(1-\mu^2)^{\frac{l\pm m}{2}}\frac{\partial f(\mu)}{\partial\mu} \; *$$

أن :

$$(L_x \pm iL_y)Y_l^m = -\hbar\sqrt{(l+1\pm m)(l\mp m)}\,Y_l^{m\pm 1} \quad (10.89)$$

وبواسطة العلاقتين الأخيريتين نجد أن :

$$L^2Y_l^m = \left[\frac{1}{2}(L_x+iL_y)(L_x-iL_y)+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{2}(L_x-iL_y)(L_x+iL_y)+L_z^2\right]Y_l^m =$$

$$= -\hbar^2\nabla^2_{\vartheta,\varphi}Y_l^m = \hbar^2 l(l+1)Y_l^m \quad (10.90)$$

ومن هنا نرى أن Y_l^m هو تابع خاص مشترك للمؤثرين L_z و L^2 ، لأن المؤثرين L_z و L^2 يتبادلان مع بعضهما ومع الهاملتونيان . وبما أن L_x و L_y لا يتبادلان مع L_z فلا يمكن اختيار ذلك التابع الموجى الذى يكون تابعا خاصا لكل المؤثرات L_x و L_y و L_z ولكن هذا لا يعنى أى تفضيل للاتجاه z ، إذ من الممكن كتابة التابع الكروى بحيث يكون تابعا خاصا مشتركا لـ L_x و L^2 وعندئذ لن يكون تابعا للمؤثر L_z .

د) **تحليل النتائج** . يتضح من عبارتى مربع عزم الاندفاع (10.90) ومسقطه على z (10.87) إن لهما على الترتيب القيم الخاصة التالية :

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \qquad l = 0, 1, 2, 3, \ldots \quad (10.91)$$

$$L_z = \hbar m, \qquad -l \leqslant m \leqslant l \quad (10.92)$$

---

* فى هذه العلاقة يجب أن تكون :

$$f(\mu) = \frac{d^{l\pm m}}{d\mu^{l\pm m}}(\mu^2-1)^l \quad (10.88)$$

ومن هنا نرى أن L^2 ينعدم عندما $l = 0$ ، بينما لا يمكن أن ينعدم فى الميكانيكا التقليدية* وهكذا لن يكون للحالة $l = 0$ أى مقابل كوانتى . وبصورة خاصة ينتج عند $L^2 = 0$ انعدام العزم الميكانيكى للذرة الموجودة فى أخفض مستوى وتؤيد النتائج التجريبية فى مجال أطياف الذرات هذه الحقيقة الكوانتية تماما . ولو اتبعنا النظرية الكلاسيكية لنتج أن :

$$L^2 = L_{z\,max}^2 = \hbar^2 l^2 \qquad (10.93)$$

أما فى النظرية الكوانتية فيكون :

$$L^2 = \hbar^2 l^2 + \hbar^2 l = L_{z\,max}^2 + \hbar^2 l \qquad (10.94)$$

ويعود ظهور الحد الاضافى للعزم المدارى $\hbar^2 l$ إلى عدم تبادل مؤثرات مسقط العزم L_x, L_y, L_z مع بعضهما ونتيجة لذلك لا يمكن تعيينهما تماما فى نفس الوقت . وفى الحقيقة عندما $L_z = L_{z\,max} = \hbar l$ ينعدم متوسطا المسقطين $\langle L_x \rangle$ و $\langle L_y \rangle$ ولا ينعدم التشتتان الوسطيان $\langle L_x^2 \rangle = \langle (\Delta L_x)^2 \rangle$ و $\langle L_y^2 \rangle = \langle (\Delta L_y)^2 \rangle$ وانما يأخذان قيمة صغرى غير محدودة لأن :

$$\langle L^2 \rangle = L_{z\,max}^2 + \langle (\Delta L_x)^2 \rangle_{min} + \langle (\Delta L_y)^2 \rangle_{min} \qquad (10.95)$$

ويمكن الحصول على القيم الصغرى $\langle (L_x)^2 \rangle$ و $\langle (\Delta L_y)^2 \rangle$ بواسطة علاقة اللاتعيين (الشك) أيضا :

$$\langle (\Delta L_x)^2 \rangle_{min} \langle (\Delta L_y)^2 \rangle_{min} = \frac{1}{4} | L_x L_y - L_y L_x |^2 =$$

$$= \frac{1}{4} \hbar^2 L_{z\,max}^2 = \frac{1}{4} \hbar^4 l^2 \qquad (10.96)$$

وبحكم التناظر بالنسبة لـ x و y يمكن أن يكون :

$$\langle \Delta L_x^2 \rangle_{min} = \langle \Delta L_y^2 \rangle_{min} = \hbar^2 \frac{l}{2} \qquad (10.97)$$

وبالتالى نحصل على العلاقة (10.94) . وهكذا نرى أن طبيعة هذا الحد الأضافى كطبيعة الطاقة الصفرية للهزاز التوافقى مرتبطة بعلاقات اللاتعيين أيضا .

---

* يعنى انعدام العزم الكلاسيكى $L = [rp]$ أحد أمرين : فإما أن تساوى السرعة الصفر ($p = 0$) أو أن تحدث الحركة ضمن المركز ، ولن ندرس هاتين الحالتين الخاصتين هنا .

البند ١١ ـ حل أبسط المسائل في الاحداثيات الكروية

أ) الدوارة . وهى عبارة عن جسيم يتحرك حرا على كرة نصف قطرها $r = a = \text{const}$. وتعتبر مسألة الدوّارة حالةخاصة من الحركة فى حقل مركزى ، عندما تكون الطاقة الكامنة ثابتة ويمكن اعتبارها معدومة حتى فى الحالة العامة أى :

$$V(a) = 0$$

وبما أن مسألة الدوّارة هى احدى مسائل القوى المركزية فإن القسم الزاوى من التابع الموجى العام هو التابع الكروى ، ولتعيين القسم القطرى نكتب طبقا لـ (10.21) المعادلة التالية :

$$\nabla_r^2 R(r) + \left[\frac{2m_0 E}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R(r) = 0 \qquad (11.1)$$

حيث اعتبرنا الطاقة الكامنة معدومة كما بدلنا λ بقيمتها $l(l+1)$ طبقا لـ (10.51) . وبما أن $r = a = \text{const}$ فإن $R(r) = R(a) = \text{const}$ أى أن $\nabla_r^2 R(a) = 0$ ومنه نحسب الطاقة E_l كالآتى :

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 a^2} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2J} \qquad (11.2)$$

حيث $J = m_0 a^2$ عزم العطالة . ويطبق نموذج الدوّارة بنجاح فى دراسة حركة الجزيئات ثنائية* الذرة وفى دراسة الحركة الدورانية للنواة . كما وتتعلق طاقة الدوّارة E_l طبقا لـ (11.2) بالعدد الكوانتى l ولا تتعلق بالعدد المغناطيسى m ، الذى يصف مسقط عزم الاندفاع L على z ، (أى

---

* وفى هذه الحالة يجب اعتبار عزم العطالة مساويا :

$$J = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2$$

حيث m_1 و m_2 كتلتا الذرتين و r_1 و r_2 بعداهما عن مركز العطالة .

لا تتعلق باتجاه العزم فى الفراغ) إلا أن التابع الخاص Y_l^m المقابل للقيمة E_l يتعلق بالعدد m ، انظر (10.67) ، وبما أن m يتغير من $-l$ إلى $+l$ ، انظر (10.64) ، لذا فإن لكل قيمة خاصة E_l العدد ($2l + 1$) من التوابع الخاصة Y_l^m المتعامدة مثنى مثنى ، التى تصف حالة الدوّارة والتى تختلف فيما بينها باتجاه L بالنسبة للمحور z ، ويقال فى هذه الحالة أن سوية الطاقة E_l منطبقة ($2l + 1$) مرة . وعندما $l = 0$ تكون لدينا سوية واحدة منطبقة مرة واحدة فيقال عنها أنها غير منطبقة . ولنذكر فى هذا المجال أننا نعتبر سوية طاقة معينة منطبقة N مرة ، إذا قابلت قيمة خاصة وحيدة للطاقة، N من التوابع الموجبة المستقلة خطيا . عدا ذلك يرتبط انطباق سويات الطاقة للدوّارة بالتناظر المركزى ولذلك تتناظر كافة الاتجاهات المارة من مركز الاحداثيات ، وعليه يجب أن يحدث الانطباق فى كل المجموعات المتناظرة مركزيا . أما عندما يتم اختيار اتجاه ما فى الفراغ ، كاتجاه حقل مغناطيسى مثلا ، فإن التناظر المركزى لا يصح ولا تبقى الاتجاهات المختلفة للعزم L متكافئة ولهذا السبب يفك الانطباق تماما أو تقل درجته . وتسمى الحالة المقابلة لـ $l = 0$ الحالة s ، والمقابلة لـ $l = 1$ الحالة p ، المقابلة لـ $l = 2$ الحالة d ، المقابلة لـ $l = 3$ الحالة f ، ثم الحالة g عندما $l = 4$ ، وهكذا . . .

ولندرس بالتفصيل الحالتين s و p للدوّارة ، فبما أن $l = m = 0$ فى الحالة s يكون التابع الخاص Y_0^0 ، الموافق للقيمة الصفرية الخاصة للطاقة $E_0 = 0$ كما يلى :

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \qquad (11.3)$$

ومنه نحسب الكثافة الاحتمالية $|Y_0^0|^2$ فنجد أن :

$$|Y_0^0|^2 = \frac{1}{4\pi} \qquad (11.4)$$

أما فى الحالة p حيث $l = 1$ فيمكن للعدد m أن يأخذ ثلاث قيم هى $1 -$ و 0

و 1 + وبالتالى توافق القيمة الخاصة $E_1 = \hbar^2/I$ ثلاثة توابع خاصة هى :

$$Y_1^{-1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, e^{-i\varphi} \sin\vartheta \qquad (11.5)$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\vartheta \qquad (11.6)$$

$$Y_1^1 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, e^{i\varphi} \sin\vartheta \qquad (11.7)$$

وعندئذ تحسب الكثافة الاحتمالية بالعلاقتين :

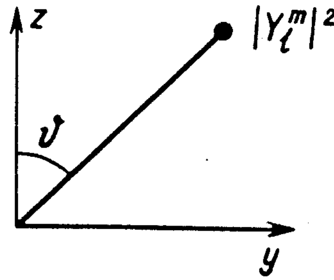
$$|Y_1^{-1}|^2 = |Y_1^1|^2 = \frac{3}{8\pi} \sin^2\vartheta \qquad (11.8)$$

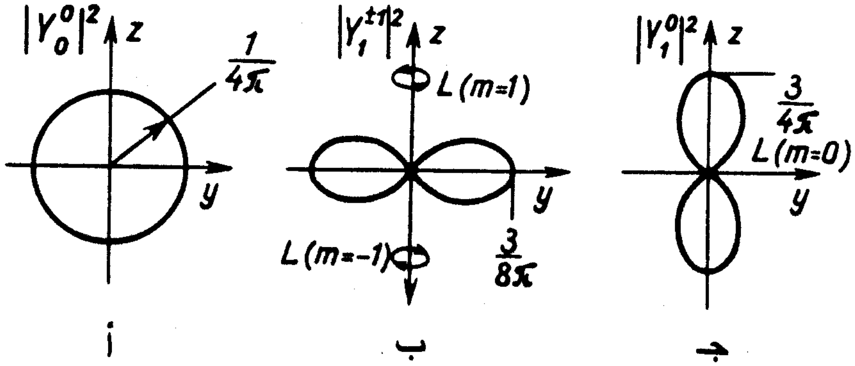
$$|Y_1^0|^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2\vartheta \qquad (11.9)$$

ويمثل المقدار $|Y_l^m|^2 \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi$ احتمال ظهور الجسيم على كرة ثابتة القطر فى المجال الزاوى φ و $\varphi + d\varphi$ و ϑ و $\vartheta + d\vartheta$. وبما أن مربع القيمة المطلقة (الطويلة) $|Y_l^m|^2$ لا يتعلق بالزاوية φ فإن احتمال ظهور الجسيم فى أى مجال زاوى $d\varphi$ يكون متساويا ، ولهذا يقابل الجداء :

$$|Y_l^m|^2\, 2\pi \sin\vartheta\, d\vartheta$$

الكثافة الاحتمالية لظهور الجسيم فى المجال ϑ و $\vartheta + d\vartheta$ ، وقد مثل توزعا الكثافة الاحتمالية (11.4) ، (11.8) و (11.9) بيانيا على الشكل (١١ ـ ١) مع العلم أننا أخذنا بعين الاعتبار استقلال المقدار $|Y_l^m|^2$ عن الزاوية φ ورسمناها بالتالى فى المستوى yz وحده وللحصول على الصورة الكاملة ينبغى تدوير الشكل حول المحور z.وكما نرى من (11.4) ومن الشكل (١١ ـ ١ ، أ) لا يتعلق اتجاه L للدوّارة بالنسبة لـ z فى الحالة s بالزاوية ϑ ، ويمكن تعليل هذا بسبب انعدام العزم $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$. ويكون احتمال وجود النقطة المادية الساكنة متساويا فى أى نقطة من الكرة ذات نصف القطر r أى أن كل أوضاع الدوارة على الكرة متكافئة ، وليس لهذه الحالة أى مقابل كلاسيكى . وينتج ومن العلاقة (11.8) والشكل





الشكل ١١ ـ ١ . توزّع الكثافة الاحتمالية للدوّارة .

(١١ ـ ١ ، ب) أن مسارات الدوّارة الأكثر احتمالا فى الحالة p ، حيث $l = 1$ و $m = \pm 1$ ، هى تلك التى تقع فى المستوى xy ، مع العلم أن اختلاف $m = 1$ و $m = -1$ عن بعضهما يكمن فى اتجاه محور الدوران فقط . فعندما $m = 1$ يكون الدوران يمينيا (اتجاه عزم الاندفاع L باتجاه المحور z) وعندما $m = -1$ يكون الدوران يساريا (اتجاه عزم الاندفاع L بعكس اتجاه المحور z) وعندما $l = 1$ و $m = 0$ تكون مدارات الدوّارة الأكثر احتمالا هى تلك التى تقع فى مستو مار من z ، انظر (11.9) والشكل (١١ ـ ١ ، ب) ويكون اتجاه العزم متعامدا مع المحور z . وبنفس الطريقة تسهل دراسة الحالات $l = 2, (m = 0, \pm 1, \pm 2), l = 3, m = 0, \pm 1, \pm 2$ إلخ . . .)

ب) **قواعد الانتقاء** . لايجاد هذه القواعد لا بد من حساب العناصر المصفوفية التالية :

$$\langle l'm' | \mathbf{r} | l\ m\rangle = \oint (Y_{l'}^{m'})^* \mathbf{r} Y_l^m \, d\Omega \qquad (11.10)$$

فإذا انعدم العنصر المصفوفى من أجل أى تغير للأعداد الكوانتية يكون الانتقال المقابل ممنوعا (لا يحدث اشعاع)* فإذا علمنا قواعد الانتقاء يمكن حساب التردد وكثافة الاشعاع ، انظر (9.8b) . لنستبدل الاحداثيات x, y, z فى (11.10) بالمتحولات :

$$z = a \cos \vartheta \qquad (11.11)$$

$$x + iy = a \sin \vartheta e^{i\varphi} \qquad (11.12)$$

$$x - iy = a \sin \vartheta e^{-i\varphi} \qquad (11.13)$$

ويكافىء هذا التغيير من وجهة النظر الفيزيائية تقسيم حركة الدوّارة إلى ثلاثة أقسام : اهتزاز على المحور z موصوف بالمركبة z ، ثم دوران يمينى فى المستوى xy موصوف بالمركبتين $x+iy$ و $x-iy$ على الترتيب ، ويجب على هذه المركبات الثلاث أن تصف حركة النقطة المادية على الكرة تماما ، وعليه تؤول قواعد الانتقاء إلى حساب العناصر المصفوفية التالية :

$$\langle l'm' | z | lm\rangle = \oint (Y_{l'}^{m'})^* \cos \vartheta Y_l^m \, d\Omega \qquad (11.14)$$

$$\langle l'm' | x + iy | lm\rangle = \oint (Y_{l'}^{m'})^* \sin \vartheta e^{i\varphi} Y_l^m \, d\Omega \qquad (11.15)$$

$$\langle l'm' | x - iy | lm\rangle = \oint (Y_{l'}^{m'})^* \sin \vartheta e^{-i\varphi} Y_l^m \, d\Omega \qquad (11.16)$$

حيث اعتبرنا $a = 1$ للتبسيط . وإذا اعتبرنا العلاقات التكرارية بين التوابع الكروية

---

* نعبر عن ذلك بشكل أكثر دقة فنقول أنه توجد فى مثل هذه الانتقالات الممنوعة ، احتمال أقل لحدوث إشعاع مضاعف (رباعى أقطاب مثلا) ، انظر البند ٩ .

$$\cos\vartheta Y_l^m = AY_{l+1}^m + BY_{l-1}^m \qquad (11.17)$$

$$\sin\vartheta e^{\pm i\varphi} Y_l^m = A_\pm Y_{l+1}^{m\pm1} + B_\pm Y_{l-1}^{m\pm1} \qquad (11.18)$$

وتطبيق شرط التعامد والمعايرة على التوابع الكروية (10.68) نجد أن :

$$\langle l'm' | z | lm\rangle = \delta_{m'm}(A\delta_{l',l+1} + B\delta_{l',l-1}) \qquad (11.19)$$

$$\langle l'm' | x+iy | lm\rangle = \delta_{m',m+1}\left(A_+\delta_{l',l+1} + B_+\delta_{l',l-1}\right) \qquad (11.20)$$

$$\langle l'm' | x-iy | lm\rangle = \delta_{m',m-1}\left(A_-\delta_{l',l+1} + B_-\delta_{l',l-1}\right) \qquad (11.21)$$

ملاحظة : يمكن حساب المعاملات A و B بسهولة وذلك بتبديل النشر (11.17) فى العلاقة (10.67) حيث :

$$P_l^m = \frac{(2l)!}{2^l l!(l-m)!}(1-x^2)^{m/2}\left\{x^{l-m} - \frac{(l-m)(l-m-1)}{2(2l-1)}x^{l-m-2} + \dots\right\}$$

وعندئذ ، نجد بعد اختصار كل المساواة على $(1-x^2)^{m/2}\,e^{im\varphi}$ ومساواة العوامل x^{l-m+1} و x^{l-m-1} فى كلا الطرفين (مساواة عوامل الحدود الأخرى المختلفة فى الأس لا تعطى شيئا جديدا) ما يلى :

$$A(l,m) = \sqrt{\frac{(l+1-m)(l+1+m)}{(2l+1)(2l+3)}}$$

$$B(l,m) = \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} \qquad (11.17a)$$

وبنفس الطريقة نجد أن :

$$A_\pm(l,m) = \pm\sqrt{\frac{(l+2\pm m)(l+1\pm m)}{(2l+1)(2l+3)}}$$

$$B_\pm(l,m) = \mp\sqrt{\frac{(l\mp m)(l-1\mp m)}{(2l+1)(2l-1)}} \qquad (11.18a)$$

ويسهل من هذه العلاقات حساب القيم العددية للعناصر المصفوفية المختلفة عن الصفر ($a = 1$) فنجد أن :

$$\langle l+1, m | z | lm\rangle = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+3)(2l+1)}}$$

$$\langle l-1, m | z | lm\rangle = \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)}} \qquad (11.19a)$$

$$\langle l+1, m\pm1 | x \pm iy | l, m\rangle = \pm\sqrt{\frac{(l+2\pm m)(l+1\pm m)}{(2l+3)(2l+1)}}$$

$$\langle l-1, m\pm1 | x \pm iy | l, m\rangle = \mp\sqrt{\frac{(l\mp m)(l-1\mp m)}{(2l+1)(2l-1)}} \qquad (11.20a)$$

مع العلم أنه يجب أن نأخذ فى كل مكان من العلاقتين الأخيرتين إما الاشارات العليا أو السفلى .

ومن هنا نحصل على قوانين الانتقاء التالية :

أ ـ للاهتزاز على z :

$$\Delta m = m - m' = 0, \quad \Delta l = l - l' = \pm 1 \qquad (11.22)$$

ب ـ للدوران اليمينى $(x + iy)$

$$\Delta m = -1, \quad \Delta l = \pm 1 \qquad (11.23)$$

جـ ـ للدوران اليسارى $(x - iy)$

$$\Delta m = \pm 1, \quad \Delta l = \pm 1 \qquad (11.24)$$

وهكذا نرى أن الانتقالات المسموحة تكون فقط تلك التى يتغير فيها العدد الكوانتى المغناطيسى m والعدد الكوانتى المدارى l حسب العلاقتين :

$$\Delta m = 0, \quad \pm 1 \qquad (11.25)$$

$$\Delta l = \pm 1 \qquad (11.26)$$

مع ملاحظة أن هذه القوانين بالنسبة m و l صحيحة وتنطبق على الجمل المتناظرة المركزية وبصورة خاصة على ذرة الهيدروجين . وبمعرفة قواعد الانتقاء نستطيع حساب الترددات المحتملة لاشعاع (أو امتصاص) الدوّارة أى أن :

$$\omega_{ll'} = 2\pi\nu_{ll'} = \frac{E_l - E_{l'}}{\hbar} \qquad (11.27)$$

وإذا عوضنا عبارة الطاقة E_l هنا ، انظر (11.2) ، وتذكرنا أن عزم عطالة الدوّارة يبقى ثابتا ، فيمكن كتابة (11.27) بالشكل التالى :

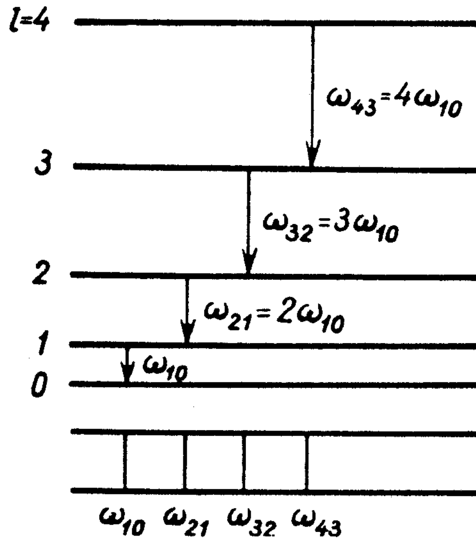
$$\omega_{ll'} = \frac{\hbar}{2J}\left[l(l+1) - l'(l'+1)\right] \qquad (11.28)$$

وطبقا لـ (11.26) نجد أن :

$$\omega_{l,\,l-1} = \frac{\hbar}{J}\, l \qquad (11.29)$$

$$\omega_{l,\,l+1} = -\frac{\hbar}{J}(l+1) \qquad (11.30)$$

مع العلم أن $\omega_{l,l-1}$ يقابل الانتقالات من سوية طاقتها أعلى إلى أخرى أدنى منها (من أعلى إلى أدنى) ، أما $\omega_{l,l+1}$ فعلى العكس ، من الأسفل إلى الأعلى . ونرى مثل هذه الطيوف الدوّارية مثلا عند دراسة طيف الجزيئات ، عندما يكون اشعاعها ناتجا عن الانتقالات الدوّارية ولذلك يحسب هذا الاشعاع بالعلاقة (11.29) . ونرى من هذه العلاقة أيضا أن الطيف الناتج عن الدوّارة يتمثل بخطوط طيفية تقع على أبعاد متساوية من بعضها ، انظر الشكل (١١ ـ ٢) ، فى المنطقة تحت الحمراء البعيدة (طول الموجة حوالى 100-300 mkm) . ولهذا ترافق دراستها بكثير من الدراسات التجريبية ، لأن قياس المسافة بين الخطوط الطيفية يسمح باعطاء فكرة عن عزم عطالة الجزىء . وأسهل طريقة لذلك ملاحظة الطيف الدوارى فى



الشكل ١١ ـ ٢ . طيف الدوارة .

شكل نطاقات عندما يجمع مع الطيف الاهتزازى حتى مع الخطوط الطيفية للذرات ، وسنهتم بذلك بالتفصيل فى البند ٢٦ المخصص لدراسة الجزىء .

جـ) الانطباق بالعدد الكوانتى المغناطيسى . سندرس مسألة أخرى تتعلق بالانطباق الكوانتى بواسطة مثال الدوّارة . فالتوابع الموجية للدوراة التى حصلنا عليها سابقا هى التوابع الكروية Y_l^m التى تمثل طبقا لـ (10.87) و (10.90) ، التوابع الخاصة للهاملتونيان :

$$H = -\frac{\hbar^2\nabla^2_{\vartheta,\varphi}}{2m_0a^2} = -\frac{\hbar^2\nabla^2_{\vartheta,\varphi}}{2J}$$

والتوابع الخاصة لمربع العزم $L^2 = -\hbar^2\nabla^2_{\vartheta,\varphi}$ ، لمسقطه على المحور z

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

ولما كانت المؤثرات تتبادل فيما بينها لذا يمكن أن نكتب :

$$HY_l^m(\vartheta,\varphi) = \frac{L^2}{2m_0a^2}Y_l^m(\vartheta,\varphi) = E_lY_l^m(\vartheta,\varphi) \qquad (11.31)$$

$$L_zY_l^m(\vartheta,\varphi) = \hbar mY_l^m(\vartheta,\varphi) \qquad (11.32)$$

وإذا انطلقنا من العبارة العامة للتابع الموجى :

$$\psi(t) = \sum_{l,m} C_{lm}Y_l^m e^{-i\frac{E_l}{\hbar}t} \qquad (11.33)$$

(تتعلق الطاقة بالعدد الكوانتى l فقط) فمن السهل البرهان على أن القيم الوسطى للمؤثرات المذكورة لا تتعلق بالزمن :

$$\langle H\rangle = \oint \psi^*(t)\,H\psi(t)\,d^3x = \sum_{l,m} E_lC^*_{l,m}C_{l,m} \qquad (11.34)$$

$$\langle L_z\rangle = \oint \psi^*(t)\,L_z\psi(t)\,d^3x = \sum_{l,m} \hbar mC^*_{lm}C_{lm} \qquad (11.35)$$

وهذا مرتبط باختصار المضروب الزمنى بسبب تعامد التوابع الموجية . وان القيم الوسطى لأى مؤثرات أخرى لا تكون Y^m تابعا خاصا لها ويجب أن تتعلق بالزمن كقاعدة عامة ، مثلا عند حساب القيمة الوسطى لمؤثر الاحداثيات z الذى يتبادل مع L_z ولكنه لا يتبادل مع H نحصل بملاحظة العلاقة (11.17) على ما يأتى :

$$\langle z \rangle = a \sum_{l,m} \{ BC^*_{l-1,m} C_{l,m} e^{-i\omega_{l,l-1}t} + AC^*_{l+1,m} C_{l,m} e^{i\omega_{l+1,l}t} \} \quad (11.36)$$

حيث يعطى المعاملان $A(l,m)$ و $B(l,m)$ بالعلاقتين (11.17a) . ولندرس الآن مؤثرين آخرين $L_x + iL_y$ و $L_x - iL_y$ وهما على العكس من الأول H يتبادلان مع الهاملتونيان ولكنهما لا يتبادلان مع L_z . فطبقا لـ (10.89) نحصل ، لحساب متوسط هذين المؤثرين على العلاقة التالية :

$$\langle L_x \rangle \pm i \langle L_y \rangle = -\sum_{l,m} \hbar \sqrt{(l-1 \pm m)(l \mp m)}\, C^*_{l,m\pm1} C_{l,m} \quad (11.37)$$

التى لا تتعلق بالزمن . وبالرغم من تناسب متوسطات هذه المؤثرات مع مجموع مربعات السعات $C_{l,m}$ و $C^*_{l,m\pm1}$ المنسوبة إلى حالات مختلفة ، فلإن لهذه السويات نفس الطاقة بسبب الانطباق . ومن الواضح أنه لو لم يحدث انطباق لسويات الطاقة أى أن الطاقة ارتبطت بالعدد الكوانتى m بالاضافة إلى العدد l لكانت القيم الوسطى للمؤثرين $L_x \pm iL_y$ توابع للزمن ، تماما كما هو الحال فى (11.36)* . وهكذا نستطيع استنتاج نتيجة عامة من هذا المثال وهى أنه إذا تواجد مؤثران أو أكثر يتبادلان مع الهاملتونيان ولكنهما

---

* نستطيع اختيار حل يكون تابعا خاصا للمؤثرين H و L_x . فإذا فرضنا أن $l = 1$ و $L_x\psi = 0$ يكون :

$$\psi = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\vartheta \cos\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_1^1 - Y_1^{-1}) \quad (11.38)$$

وبالرغم من أن هذا الحل يحقق معادلة شرودينجر . فليس له قيمة خاصة عند تأثير L_z عليه ، لأنه هو عبارة عن تركيب خطى لحلول مختلفة بالعدد الكوانتى m .

لا يتبادلان مع بعضهما فهذا يعنى وجود انطباق فى الجملة الكوانتية . وعندئذ يمكن البحث عن الحل بشكل موجة مستوية ، انظر البند ٤ ، أو بشكل موجة كروية ، طالما أن الحالة $V = 0$ يمكن تطبيقها أيضا على التناظر الكروى ، وعند حل المسألة فى الاحداثيات الكروية نجد لحساب التابع القطرى المعادلة التالية :

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u = 0 \qquad (11.39)$$

حيث :

$$k = \sqrt{\frac{2m_0E}{\hbar^2}} > 0, \qquad u = rR_l$$

وإذا فرضنا تابعا جديدا $\chi = \sqrt{r}\,R_l = \frac{u}{\sqrt{r}}$ فإن (11.39) تتحول إلى الشكل التالى :

$$\chi'' + \frac{1}{r}\chi' + \left(k^2 - \frac{(l+{}^1/_2)^2}{r^2}\right)\chi = 0 \qquad (11.40)$$

وهى معادلة بيسل ذات الترتيب نصف الصحيح $\pm(l+{}^1/_2)$ لمتحول حقيقى . وإذا اعتبرنا أن التابع الموجى يجب أن يبقى محدودا عندما $r \to 0$ فلا بد نبقى فى الحل توابع بيسل ذات الترتيب الموجب ، عندما*

$$R_l = \frac{C_l}{\sqrt{kr}} J_{l+{}^1/_2}(kr) \qquad (11.41)$$

ومن هنا ينتج أن الحل العام للمعادلة الموجية لجسيم حر طاقته معلومة فى الاحداثيات الكروية يكتب ، انظر (10.19) ، بالشكل التالى :

$$\psi(\vartheta, \varphi, r) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} C_l^m Y_l^m(\vartheta, \varphi) \frac{1}{\sqrt{kr}} J_{l+{}^1/_2}(kr) \qquad (11.42)$$

* ان حل (11.41) عندما $r \to 0$ هو من الشكل $R_l \sim r^l$ لأن تابع بيسل ذا الترتيب السالب $(l + {}^1/_2)$ يعطى نتيجة متباعدة $R_l' \sim r^{-1-l}$ ولذلك نهمله .

حيث تحسب C_l^m من شروط اضافية ، أما Y_l^m فهو التابع الكروى ، انظر (10.67) . وبواسطة العلاقة الأخيرة نستطيع نشر الموجة المستوية $\psi = e^{ikz}$ التى تحقق أيضا معادلة شرودينجر للحركة الحرة :

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = 0 \tag{11.43}$$

بأمواج كروية . وإذا كتبنا الموجة المستوية بالشكل التالى :

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\vartheta} = e^{iyx} \tag{11.44}$$

حيث $y = kr$ و $x = \cos\vartheta$ ، فيجب اعتبار $m = 0$ فى عبارة التابع الكروى (لأن e^{ikz} لا يتعلق بالزاوية φ) ثم البحث عن الحل بشكل نشر بتوابع ليجاندر :

$$e^{iyx} = \sum_{l=0}^{\infty} B_l(y) P_l(x) \tag{11.45}$$

ثم إذا أخذنا شرط التعامد والمعايرة لكثير حدود ليجاندر ، أى :

$$\int_{-1}^{+1} dx P_l(x) P_{l'}(x) = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'} \tag{11.46}$$

(الذى يمكن التأكد منه بسهولة من المساوتين (10.67) و (10.68) إذا فرضنا فيهما $m = 0$) أى أن :

$$B_l(y) = {}^1/_2(2l+1)\int_{-1}^{1} e^{iyx} P_l(x)\, dx \tag{11.47}$$

وبالتعويض هنا عن كثير حدود ليجاندر من (10.59) ثم اسقاط l مرة مشتق التابع $(x^2 - 1)^l$ على التابع e^{iyx} نجد أن :

$$B_l(y) = \frac{1}{2^{l+1}l!}(2l+1)\, i^l y^l \int_{-1}^{1} (1-x^2)^l e^{iyx}\, dx \tag{11.48}$$

وأخيرا إذا استخدمنا من نظرية توابع بيسل العلاقة التالية :

$$\int_{-1}^{1} (1-x^2)^l e^{ixy}\, dx = \sqrt{\pi}\, l! \left(\frac{2}{y}\right)^{l+1/2} J_{l+1/2}(y) \qquad (11.49)$$

نجد للمعامل $B_l(y)$ المعادلة التالية :

$$B_l(y) = \sqrt{\frac{\pi}{2y}}\, (2l+1)\, i^l J_{l+1/2}(y)$$

وعندئذ يأخذ نشر الموجة المستوية المطلوب الشكل الآتى :

$$e^{ikr\cos\vartheta} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l\, (2l+1) \frac{J_{l+1/2}(kr)}{\sqrt{kr}} P_l(\cos\vartheta) \quad (11.50)$$

ومن المعلوم أنه عندما $r \to 0$ يمكن استخدام عبارة تابع بيسل التقاربى

$$J_{l+1/2}(kr) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, \frac{\sin(kr - 1/2\pi l)}{\sqrt{kr}} \qquad (11.51)$$

ولهذا يتحدد السلوك التقاربى للموجة المستوية بالعلاقة التالية :

$$e^{ikr\cos\vartheta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l\, (2l+1) \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}{kr} P_l(\cos\vartheta) \quad (11.52)$$

د) **الحل التقاربى فى حالة القوى قصيرة المدى** . نكتب معادلة شرودينجر لكل القوى المركزية فى الحالة العامة طبقا لـ (10.21) بالشكل* :

$$\frac{d^2u'}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{2m_0}{\hbar^2} V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) u' = 0 \qquad (11.53)$$

حيث $u' = rR'_l$. وعندما تكون $V = 0$ (الحركة الحرة وهى أبسط حالة خاصة من حالات القوى قصيرة المدى يتعين الحل بالمساواة (11.41) التى تعطى ، إذا اعتبرنا العلاقة التقريبية (11.51) صحيحة عندما $r \to \infty$ ، ما يلى :

* سنرمز بـ R'_l للتابع القطرى للحركة الحرة .

$$R_l(kr) = \frac{C_l}{k}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}{r} \qquad (11.54)$$

وبما أن الحل (11.54) يخص الطيف المستمر فيمكن حساب العوامل C_l

بطريقة معايرة على التابع δ أى أن :

$$\int_0^\infty r^2 R_l(kr)\, R_l(k'r)\, dr = \delta(k - k') \qquad (11.55)$$

وإذا لاحظنا أن :

$$\int_0^\infty \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) \sin\left(k'r - \frac{\pi l}{2}\right) dr =$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^\infty \cos(k - k')\, r\, dr - \frac{1}{2}(-1)^l \int_0^\infty \cos(k + k')\, r\, dr = \frac{\pi}{2}\,\delta(k - k')$$

فإننا نجد من (11.55) :

$$C_l = k \qquad (11.56)$$

ولهذا نكتب الحل المعاير فى الحركة الحرة ، عندما r كبيرة ، بالشكل الآتى :

$$R_l = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{\sin\left(kr - \frac{\pi}{2}\, l\right)}{r} \qquad (11.57)$$

وبمعرفة الحل فى حالة الحركة الحرة نستطيع معرفة الحل التقاربى فى حالة القوى قصيرة المدى الأخرى أيضا بشرط أن يزداد $V(r)$ عندما $r \to 0$ بأقل مما يزداد التابع r^{-2}، وعلى العكس من ذلك يتناقص عندما $r \to \infty$ أقل مما يتناقص به التابع r^{-2} (بقانون أسى مثلا). ويمكن معرفة ارتباط العبارة التقاربية بالجيب عند وجود القوى المؤقتة بسهولة ، وذلك باهمال الحدود التى تتناسب مع $V(r)$ ، واهمال $\frac{l(l+1)}{r^2}$ فى العبارة (11.53) ، بحيث أنه

عندما $r \to \infty$ نجد* :

$$R_l' = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)}{r} \qquad (11.58)$$

أن القيمة المجهولة هنا هى الطور δ_l الذى يجب أن يتناسب مع كمون القوى المؤقتة V لأنه ينعدم عندما $V = 0$ (الحركة الحرة) . وتنحصر مسألتنا الآن فى حساب δ_l فى التقريب الخطى الأول بالنسبة إلى V ولهذا نضرب المعادلة (11.39) بـ u' و (11.53) بـ u ونطرح الثانية من الأولى فنجد أن :

$$\frac{d}{dr}\left(u' \frac{du}{dr} - u \frac{du'}{dr}\right) = -\frac{2m_0}{\hbar^2} uu'V \qquad (11.59)$$

وإذا استكملنا العبارة الأخيرة من الصفر حتى قيمة ما r فنستطيع أن نضع، فى الطرف الأيسر من (11.59) المتعلق بالمتغير r وحده بعد تبديل حدود التكامل ، الحلين التقاربيين (11.57) و (11.58)،ونحصل بعد تحويلات بسيطة على ما يلى :

$$\sin \delta_l = -\frac{\pi m_0}{k\hbar^2} \int_0^r uu'V\, dr$$

ونستطيع أن ننهى الحد الأعلى للتكامل إلى اللانهاية فى حالة كمون القوى المؤقتة . أما فى حالة القيم الصغيرة لـ $\sin \delta_l \sim \delta_l$ فنقتصر على الحدود الخطية بالنسبة إلى V ، كما أنه فى الطرف الأيمن من المساواة الأخيرة يمكن اهمال V أى وضع $u = u'$. وعندئذ إذا عوضنا فى طرف المساواة الأيمن العبارة (11.41) وفرضنا $C_l = k$ ، انظر (11.56) فإننا نجد :

$$\delta_l = -\frac{\pi m_0}{\hbar^2} \int_0^\infty V r J^2_{l+1/2}(kr)\, dr \qquad (11.60)$$

---

* ستكون شروط المعايرة هنا مشابهة تماما لحالة الحركة الحرة ولهذا يبقى معامل المعايرة كما هو فى العلاقة (11.57) .

وتعين العلاقتان (11.58) و (11.60) السلوك التقاربى للقسم القطرى من التابع الموجى من أجل القيم الصغرى للطور ($\delta_1 \ll 1$) δ_l .

البند ١٢ ـ نظرية الذرة الشبيهة بالهيدروجين (مسألة كبلر)

لقد فتحت دراسة الالكترون فى الحقل الكولونى للذرة (الذرة الشبيهة بالهيدروجين) بطرائق الميكانيكا الكوانتية آفاقا واسعة لدراسة بنية الذرة بصورة عامة . وتعتبر هذه النظرية من وجهة النظر الرياضية كتعميم كوانتى للنظرية الكلاسيكية لحركة الكواكب حول الشمس (مسألة كبلر) وهى أيضا جديرة بالاهتمام من الناحية المنهجية لأنها تقبل حلا دقيقا كما فى حالة الهزاز التوافقى والدوارة .

أ) المعادلة القطرية . تكتب طاقة التأثير المتبادل بين الالكترون والنواة كالآتى :

$$V = -\frac{Ze_0^2}{r} \qquad (12.1)$$

حيث r المسافة بين الالكترون ومركز النواة و Z ترتيب للذرة (العدد الذرى) و ($Z = 1$ للهيدروجين ، $Z = 2$ للهليوم . . إلخ . . .) أما e_0 فهى شحنة الالكترون و Ze_0 شحنة النواة . وتعتبر نواة الذرة ثابتة فى كثير من الحالات* ولذلك من الطبيعى أن نضع مركز الاحداثيات فيها ، وعندئذ يمكن اعتبار القسم الزاوى Y_l^m من التابع الموجى معلوما ، انظر (10.67) ، ولتعيين سويات الطاقة وحساب القسم القطرى $R_l(r)$ نستخدم المعادلة (10.21) التى تأخذ الشكل التالى :

---

* وبعبارة أدق نقول أن مركز الثقل يبقى ثابتا ، ولكن إذا اعتبرنا أن الكتلة أخف ذرة (كتلة ذرة الهيدروجين) أكبر بـ 1840 مرة تقريبا من كتلة الالكترون ، يكون مركز الثقل أقرب بـ 1840 إلى النواة منه إلى الالكترون وبالتالى يمكن فى التقريب الأول اعتبار هذا المركز ينطبق على مركز النواة ، أما التصحيح الواجب ادخاله فى هذا المجال فسيدرس فى نهاية هذا البند .

$$\nabla_r^2 R + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze_0^2}{r} - \frac{\hbar^2 l\,(l+1)}{2m_0 r^2}\right) R = 0 \qquad (12.2)$$

ولنفرض أن الجهد (الكمون) الفعال V_{eff} هو :

$$V_{eff} = -\frac{Ze_0^2}{r} + \frac{\hbar^2 l\,(l+1)}{2m_0 r^2} \qquad (12.3)$$

حيث يخص الحد الأول القوى الكولونية أما الثانى فيخص القوى النابذة .

ولنحاول تفسير العبارة (12.3) من وجهة نظر كلاسيكية ، ولهذا سننطلق ، انظر أيضا (10.70) ، من العبارة الكلاسيكية :

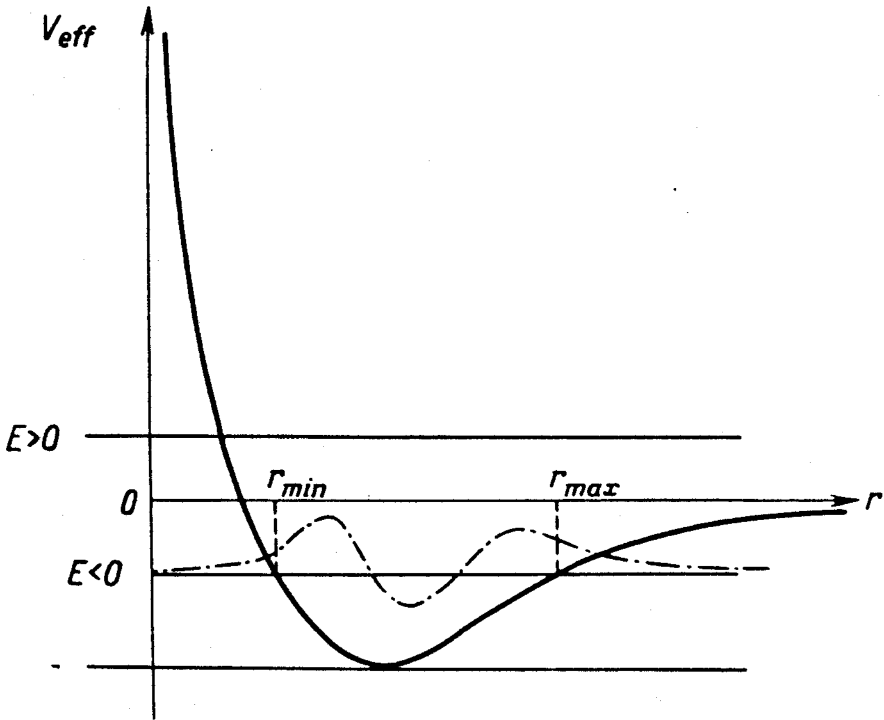
$$\frac{p_r^2}{2m_0} = E - \left(-\frac{Ze_0^2}{r} + \frac{p_\varphi^2}{2m_0 r^2}\right) \qquad (12.3a)$$

وإذا اعتبرنا $p_\varphi = \text{const}$ فى حالة القوى المركزية يمكننا أن نكتب :

$$V_{eff} = -\frac{Ze_0^2}{r} + \frac{p_\varphi^2}{2m_0 r^2}$$

ولتعميم هذه العلاقة على الحالة الكوانتية نعوض عن p^2_φ بقيمتها $p_\varphi^2 = \hbar^2 l\,(l+1)$ وبنفس الطريقة نستطيع فهم المقدار $\frac{1}{2m_0}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_r\right)^2$ فى (12.2) كأنها $\frac{p_r^2}{2m_0}$

وقد مثل الكمون V_{eff} بيانيا على الشكل (١٢ - ١) ، ومنه نستنتج بصورة خاصة أنه إذا كانت الطاقة الكلية E للالكترون سالبة ($E < 0$) فإن حركته ستحدث فى مجال محدود من طرفيه بحاجزين كمونيين (والشبيه الكلاسيكى لذلك هو المدارات الاهليلجية) لذلك يجب أن يكون لطيف هذا الالكترون خواص تقطعية . أما عندما $E > 0$ فلن يتواجد الحاجز من جهة اليمين ($r \to \infty$) ويصبح وضع الالكترون غير محدود عندما تكون r كبيرة (والشبيه الكلاسيكى هو المدارات الزائدية) . وبما أن وضع الالكترون فى الذرة يجب أن يكون محدودا بقيمة ما لـ r_{max} ، فمن الطبيعى أن تعتبر عند بناء نظرية ذرة الهيدروجين أن $E < 0$ وعندئذ تكتب المعادلة (12.2) بالشكل التالى :



الشكل ١٢ ـ ١ . الخط البيانى لعلاقة الطاقة الكامنة (الخط المتصل) بالمسافة ، انظر العلاقة (12.3) . أما التابع الموجى فهو مبين بخط متقطع .

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\left(-A+\frac{2B}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R=0 \qquad (12.4)$$

حيث

$$\frac{m_0 2e_0^2}{\hbar^2}=B>0 \qquad -\frac{2m_0E}{\hbar^2}=A>0 \qquad (12.5)$$

وعند ادخال المتغير الجديد ρ حسب العلاقة :

$$\rho=2\sqrt{A}\,r \qquad (12.6)$$

نحصل على المعادلة التالية :

$$R''+\frac{2}{\rho}R'+\left\{-\frac{1}{4}+\frac{B}{\sqrt{A}\,\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right\}R=0 \qquad (12.7)$$

حيث $R' = (dR/dp$ وبدراسة الخط البيانى للكمون الفعال V_{eff} يمكننا أن نحدد السلوك العام لحل المعادلة ، لأنه سيكون داخل الحفرة :

$$r_{min}<r<r_{max}$$

أى له خصائص اهتزازية ، أما خارجها فسنجد حلين متزايد ومتناقص . ومن الضرورى أن نختار تلك الشروط التى تستثنى الحل المتزايد بشكل غير محدود لأن ذلك هو المطلوب ، كما فى حالة الهزاز التوافقى ، ولأنه يؤدى إلى حساب سويات الطاقة المتقطعة للالكترون . وبما أن الحفرة غير متناظرة فسنبحث عن الحلين المتقاربين عندما $\rho \to \infty$ وعندما $\rho \to 0$ بشكل منفرد . ولذلك يمكن ايجاد الحل التقاربى عندما $\rho \to \infty$ طبقا لـ (12.7) من المعادلة التالية :

$$R''_\infty - {}^1\!/_4 R_\infty = 0 \qquad (12.8)$$

أى أن :

$$R_\infty = C_1 e^{-{}^1\!/_2 \rho} + C_2 e^{{}^1\!/_2 \rho} \qquad (12.9)$$

وحتى نحذف الحل المتزايد أسيا ينبغى أن نجعل $C_2 = 0$. أما C_1 فيمكن ادخاله فى مضروب المعايرة العام للتابع الموجى ولهذا نعتبره مساويا الواحد وعندئذ يكون لدينا :

$$R_\infty = e^{-{}^1\!/_2 \rho} \qquad (12.10)$$

ولتعيين الحل التقاربى عندما $\rho \to 0$ سنجد طبقا لـ (12.7) المعادلة التالية* :

$$R''_0 + \frac{2}{\rho} R'_0 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R_0 = 0 \qquad (12.11)$$

ومنه إذا فرضنا $R_0 = \rho^q$ | نجد أن $q(q+1) - l(l+1) = 0$ أى أن $q_1 = l$ و $q_2 = -(l+1)$

وبالتالى

$$R_0 = C_1 \rho^l + C_2 \rho^{-l-1} \qquad (12.12)$$

---

* عندما $p \to 0$ سيكون الحدان $-{}^1\!/_4$ و $\frac{B}{\sqrt{\lambda}\,\rho}$ أصغر بكثير من $\frac{l(l+1)}{\rho^2}$ ولذلك نهملهما .

وبفرض أن $C_2 = 0$ (عندئذ يستثنى الحل المتزايد غير المحدود عندما $\rho = 0$) و $C_1 = 1$ ، وعندها نحصل على أن

$$R_0 = \rho^l \qquad (12.13)$$

ويمكن أيضا كتابة المعادلة (12.7) بالشكل التالى :

$$\frac{d^2\rho R}{d\rho^2} + \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{B}{\rho\sqrt{A}} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right\} \rho R = 0 \qquad (12.7a)$$

وسنختار حلها العام بالشكل :

$$R = R_\infty R_0 u \qquad (12.14)$$

وفى هذه الحالة يكون

$$\rho R = \rho^{l+1} e^{-\frac{1}{2}\rho} u = vu$$

ولحساب التابع المجهول u نكتب المعادلة التالية :

$$u'' + 2u' \frac{v'}{v} + \left\{ \frac{v''}{v} - \frac{1}{4} + \frac{B}{\rho\sqrt{A}} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right\} u = 0 \quad (12.7b)$$

وإذا لاحظنا أن

$$\ln v = -\frac{1}{2}\rho + (l+1)\ln\rho$$

نجد أن

$$\frac{v'}{v} = (\ln v)' = -\frac{1}{2} + \frac{l+1}{\rho}, \quad v' = \left(-\frac{1}{2} + \frac{l+1}{\rho} \right) v$$

وأن

$$v'' = -\frac{l+1}{\rho^2} v + \left(-\frac{1}{2} + \frac{l+1}{\rho} \right)^2 v$$

وأخيرا نستخلص :

$$\frac{v''}{v} = \frac{1}{4} - \frac{l+1}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}$$

وإذا استفدنا من العلاقات السابقة فإن العلاقة (12.7b) تتحول إلى الشكل التالى :

$$\rho u'' + [2(l+1) - \rho] u' + \left[\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1\right] u = 0 \qquad (12.15)$$

ب) **المدارات الدائرية** . لندرس أولا الحالة الخاصة عندما ينعدم المعامل أمام التابع u فى المعادلة (12.15) ، أى أن :

$$\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 = 0 \qquad (12.16)$$

ويكون حل المعادلة من الشكل $u = \text{const} = C$ ومنه ينتج أن النسبة $B/\sqrt{A}$ تساوى عددا صحيحا موجبا . . . . $n = 1, 2, 3$ أى أن :

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = n = l + 1 = 1,\ 2,\ 3, \ldots \qquad (12.17)$$

وهو ما يسمى بالعدد الكوانتى الرئيسى وبحل المعادلة (12.17) باعتبار العلاقة (12.5) نكتب طيف طاقة الذرة الشبيهة بالهيدروجين :

$$E_n = -\frac{Z^2 e_0^4 m_0}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \qquad (12.18)$$

حيث R ثابت ريدبيرج التالى :

$$R = \frac{e_0^4 m_0}{2\hbar^3}$$

أما التابع القطرى (12.14) ، حسب الشرط (12.16) فيكتب بالشكل التالى :

$$R_{nl} = C\rho^l e^{-\frac{1}{2}\rho} \qquad (12.19)$$

حيث C ثابت المعايرة الذى يحسب من التكامل التالى :

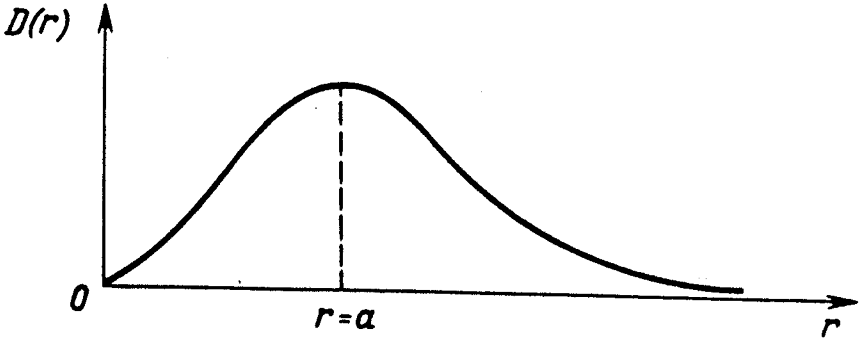
$$\int_0^\infty r^2 R_{nl}^2\, dr = 1 \qquad (12.20)$$

أما القيمة

$$D(r) = r^2 R^2(r) \qquad (12.21)$$

الواقعة تحت التكامل (12.20) فتمثل توزع الكثافة الاحتمالية لنصف القطر r . وإذا اعتبرنا شكل التابع (12.19) والعلاقات (12.6) و (12.17) فإننا نجد عبارة $D(r)$ التالية :

$$D(r) = \text{const}\ \rho^{2n} e^{-\rho} \qquad (12.22)$$



الشكل ١٢ ـ ٢ . توزع الكثافة الاحتمالية القطرية فى حالة المدارات الدائرية .

ولهذا التابع نهاية عظمى واحدة (الشكل ١٢ ـ ٢) ، ولهذا السبب فإن الشرط (12.16) يقابل الحركة بمدارات دائرية ، ونحسب هذه النهاية بالشكل التالى :

$$\left(\frac{dD(r)}{dr}\right)_{r=r_n} = 0$$

ونجد أن $\rho_n = 2n$ أى أن نصف قطر المدارات الدائرية يعطى بالعلاقة الآتية :

$$r_n = \frac{\rho_n}{2\sqrt{A}} = \frac{n^2}{Z} a_0 \qquad (12.23)$$

حيث يمثل المقدار :

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2} \approx 0{,}5 \cdot 10^{-8}\ \text{cm} \qquad (12.24)$$

نصف قطر مدار بور الأول وهو يقابل اخفض مدار ، أى الحالة الأساسية لذرة الهيدروجين ($Z = 1$) عندما $n = 1$ وإذا أخذنا بعين الاعتبار نصف قطر مدار بور الأول a_0 فيمكن كتابة العلاقة (12.6) بين r و ρ بالشكل التالى :

$$r = n a_0\ \rho / 2Z$$

وعندئذ إذا حسبنا تكامل المعايرة (12.20) للتابع (12.19) بواسطة العلاقة :

$$\int_0^{\infty} \rho^{2n} e^{-\rho}\, d\rho = (2n)!$$

نحصل على معامل المعايرة :

$$C = \sqrt{\frac{8Z^3}{n^3 a_0^3 (2n)!}} \qquad (12.25)$$

وهكذا يصبح التابع القطرى R_{nl} فى حالة المدارات الدائرية مساويا المقدار

$$R_{n,\,n-1} = \sqrt{\frac{8Z^3}{n^3 a_0^3 (2n)!}} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{n-1} e^{-\frac{Zr}{na_0}} \qquad (12.26)$$

ومن هنا نرى أنه فى الحالة الخاصة عندما $n = 1$ ($l = n-1 = 0, m = 0$) حيث يساوى القسم الزاوى Y_l^m من التابع الموجى $\psi_{nlm} = R_{nl} Y_l^m$ مقدارا ثابتا ، هو $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$ وعندئذ نحصل على التابع :

$$\psi_{100} = R_{10} Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \qquad (12.27)$$

ويلاحظ أنه ليس للحالة ψ_{100} أى شبيه كلاسيكى .

جـ) **المدارات الاهليلجية** . لنحسب الآن التابع القطرى عندما يختلف المعامل أمام u عن الصفر أى $B/\sqrt{A}-l-1\neq 0$ وهذا ما يقابل المدارات الأهليلجية فى الميكانيكا الكلاسيكية ، نلاحظ أن المعادلة (12.15) هى حالة خاصة من المعادلة التفاضلية ذات الوسيطين العقديين الاختياريين α و β أى أن :

$$x\frac{d^2F}{dx^2}+(\beta-x)\frac{dF}{dx}-\alpha F=0 \qquad (12.28)$$

وقد يكون المتغير x عقديا أيضا . أما التابع الهندسى المتسامى $F=\Phi(\alpha,\beta,x)$ الذى يحقق المعادلة (12.28) فيكتب كالآتى :

$$\Phi(\alpha,\beta,x)=1+\frac{\alpha}{\beta}\frac{x}{1!}+\frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)}\frac{x^2}{2!}+\cdots \qquad (12.29)$$

ويأخذ قيمة محددة فى النقطة $x=0$ هى $\Phi(\alpha, \beta, x)=1$ أما عندما $x\to\infty$ فإن للتابع Φ سلوكا تقاربيا ، أى أن :

$$\Phi(\alpha,\beta,x)\simeq\frac{\Gamma(\beta)}{\Gamma(\beta-\alpha)}(-x)^{-\alpha}\left[1+\frac{\alpha}{x}(\beta-\alpha-1)+\ldots\right]+$$
$$+\frac{\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha)}e^{x}x^{\alpha-\beta}\left[1+\frac{(\alpha-\beta)(\alpha-1)}{x}+\ldots\right] \qquad (12.30)$$

حيث أن $\Gamma(\alpha)$ التابع جاما ، أما العبارة ضمن الأقواس المتوسطة فهى متسلسلات تقاربية بقوى x المقلوبة . وينتج من (12.6) أن $u=C\,\Phi(\alpha, \beta, \rho)$. مع العلم أن الوسيطين α و β يأخذان القيمتين التاليتين :

$$\alpha=1+l-\frac{B}{\sqrt{A}},\quad \beta=2(l+1)$$

حيث C ثابت اختيارى . وعندئذ يعطى التابع القطرى (12.14) بالعلاقة :

$$R=Ce^{-\rho/2}\rho^{l}\Phi\left\{-\left(\frac{B}{\sqrt{A}}-l-1\right),\ 2(l+1),\ \rho\right\} \qquad (12.31)$$

ويدل السلوك التقاربى للتابع المتسامى أنه يزداد عندما $\rho\to\infty$ كما

يزداد المقدار e^{ρ} أيضا ، لهذا كان لا بد لتحقيق شرط محدودية التابع القطرى (12.31) أن يساوى الوسيط $\alpha = 1 + l - B/\sqrt{A}$ عددا سالبا صحيحا أو صفرا ، أى أن :

$$\alpha = -n_r = 0, -1, 2, \dots$$

وعندئذ يصبح التابع ـ جاما $\Gamma(-n_r)$ لا نهائيا ويختفى القسم المتزايد أسيا فى (12.30) ومنه نرى أنه لحساب الطاقة المرتبطة بـ A و B بالعلاقتين (12.5) نكتب :

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = n_r + l + 1 = n \qquad (12.32)$$

وعليه فإن العدد الكوانتى n أكبر من مجموع العددين الكوانتيين المدارى :

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

والقطرى :

$$n_r = 0, 1, 2, 3, \dots \qquad (12.33)$$

بمقدار واحد . ويسمى العدد n بالعدد الكوانتى الرئيسى وقد يساوى كما فى حالة المدارات الدائرية إلى :

$$n = 1, 2, 3, \dots \qquad (12.33a)$$

وعندما يتحقق الشرط $\alpha = -n_r$ تنقطع المتسلسلة المتسامية (12.29) وتصبح كثير حدود درجته n_r أى أن :

$$\Phi(-n_r, 2l+2, \rho) = \frac{(2l+1)!}{(2l+1+n_r)!} Q_{n_r}^{2l+1}(\rho) \qquad (12.34)$$

حيث يرمز بـ $Q_{n_r}^{2l+1}(\rho)$ إلى ما يسمى كثير حدود لاجير المعمم :

$$Q_\kappa^s(\rho) = \sum_{j=0}^{\kappa} (-1)^{\kappa+j} \rho^{\kappa-j} \frac{\kappa!\,(\kappa+s)!}{j!\,(\kappa-j)!\,(\kappa+s-j)!} \qquad (12.35)$$

حيث $s = 2l + 1$ و $k = n_r$ وقد يكتب كثير الحدود (12.35) بالشكل المغلق :

$$u = Q_\kappa^s(\rho) = e^{\rho}\rho^{-s}\frac{d^\kappa}{d\rho^\kappa}\left(e^{-\rho}\rho^{\kappa+s}\right) \qquad (12.36)$$

ملاحظة : لنبرهن أن التابع u المكتوب بالشكل (12.36) يحقق بالفعل المعادلة (12.15) ولذلك نقول أن التابع $v = e^{-\rho}\rho^{\kappa+s}$ يحقق المعادلة $\rho v' + (\rho - \kappa - s)v = 0$ وليس من الصعب التحقق من هذا ، إذا أخذنا المشتقة الأولى لـ v فإذا استقينا المعادلة ($k + 1$) مرة حسب قاعدة لبنيز من السهل تحويلها إلى الشكل :

$$\rho v^{(\kappa+2)} + (\rho - s + 1)\, v^{(\kappa+1)} + (\kappa + 1)\, v^{(\kappa)} = 0$$

وإذا أدخلنا تابعا جديدا $w = v^{(\kappa)}e^{\rho}\rho^{-s}$ نجد أنه يحقق المعادلة التالية :

$$\rho w'' + (s + 1 - \rho)\, w' + \kappa w = 0$$

والتى تتطابق مع المعادلة (12.15) التى يحققها التابع u (لأن $(B/\sqrt{A}) - l - 1 = k$) وبما أنه من السهل البرهان أن المعامل أمام الحد الأعلى فى التابع :

$$w = e^{\rho}\rho^{-s}\frac{d^\kappa}{d\rho^\kappa}\left(e^{-\rho}\rho^{\kappa+s}\right)$$

يتطابق مع المعامل المقابل فى المساواة (12.35) لذا نكون بالتالى قد برهنا صحة العلاقة (12.36) .

ونرى أخيرا أن التابع $R_{nl}(r)$ يصبح مساويا المقدار :

$$R_{nl}(\rho) = C_{nl}e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^{l}Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \qquad (12.37)$$

حيث $\rho = \frac{2Zr}{na_0}$ و a_0 هو نصف قطر مدار بور الأول (12.24) . ويصف الحل (12.37) الذى حصلنا عليه ، المدارات الأهليلجية . ولتحليل هذه الحركة فى الحالة الكوانتية ينبغى دراسة التوزع الاحتمالى بالنسبة للقطر r :

$$D(r) = \text{const}\, r^{2l+2}e^{-\frac{2Zr}{na_0}}\left(Q_{n-l-1}^{2l+1}\right)^2 = \text{const}\, \rho^{2l+2}e^{-\rho}\left(Q_{n-l-1}^{2l+1}\right)^2$$

ويمكن البرهان أن للتابع $D(r)$ عندما $\rho = 0$ و $\rho = \infty$ و $Q_{n-l-1}^{2l+1} = 0$ (جذرا $n - l - 1 = n_r$) و $n_r + 2$ نهاية صغرى عندما ينتهى إلى الصفر

و $n_r + 1$ نهاية عظمى ، تحسب جميعها من المعادلة $\partial D/\partial r = 0$. أما المجال $(r_1 < r < r_2)$ حيث يكون للتابع $D(r)$ خواص اهتزازية فيقابل فى التقريب الكلاسيكى مدارا اهليلجيا يتغير فيه بعد الجسم عن المركز ضمن المجال المذكور . ولنحسب أخيرا المعالم C_{nl} من شرط المعايرة :

$$\int_0^\infty r^2 R_{nl}^2\, dr = \int_0^\infty D(r)\, dr = 1 \qquad (12.38)$$

فنجد أن :

$$C_{nl} = \left(\frac{Z}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{4}{n(n-l-1)!(n+l)!}} \qquad (12.39)$$

أى أن :

$$R_{nl} = \left(\frac{Z}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{4}{n(n-l-1)!(n+l)!}} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l e^{-\frac{Zr}{na_0}} Q_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right) \qquad (12.40)$$

ملاحظـة : يحسب التابع C_{nl} بالطريقة التالية : إذا عوضنا فى شرط المعايرة (12.38) عن R_{nl} بقيمته من العلاقة (12.35) وبدلنا r بـ $\rho\,\frac{na_0}{2Z}$ نجد $(n_r = \kappa)$ أن :

$$C_{nl}^2 \left(\frac{na_0}{2Z}\right)^3 \int_0^\infty \rho^{2l+2} e^{-\rho} Q_\kappa^{2l+1} Q_\kappa^{2l+1}\, d\rho = 1$$

ثم نكتب كثير الحدود Q_κ^{2l+1} بشكل متسلسلة من (12.35) بينما نترك الآخر فى شكله المغلق (12.36) . وعندئذ يأخذ شرط المعايرة المكتوب سابقا الشكل التالى :

$$C_{nl}^2 \left(\frac{na_0}{2Z}\right)^3 \int_0^\infty \rho(-1)^\kappa \{\rho^\kappa - \kappa(\kappa+2l+1)\rho^{\kappa-1} + \ldots\} \frac{d^\kappa}{d\rho^\kappa}(e^{-\rho}\rho^{\kappa+2l+1})\, d\rho = 1$$

فإذا استخدمنا نظرية اسقاط المشتقات ، انظر (6.14) ، نجد أن :

$$C_{nl}^2 \left(\frac{na_0}{2Z}\right)^3 \int_0^\infty e^{-\rho} \left[(\kappa+1)!\,\rho^{2l+\kappa+2} - \kappa!\,\kappa(2l+\kappa+1)\,\rho^{2l+\kappa+1}\right] d\rho = 1$$

ومن السهل التأكد أن بقية حدود المتسلسلة Q_κ^s تعطى صفرا لأننا نشتقها أكثر من أعلى أس لـ ρ فيها .

وإذا استفدنا من العلاقة $\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^s\,d\rho = s!$ فمن السهل أن نتاكد من صحة العلاقة (12.39) * . وبنفس الطريقة يمكن حساب $\langle r^{-\nu}\rangle$ $(\nu = 1, 2, 3, 4)$ الذى سنحتاجه فيما بعد

$$\langle r^{-\nu}\rangle = \int \psi^*_{nlm} r^{-\nu}\psi_{nlm}\, d^3x = \int_0^\infty R^2_{nl} r^{-\nu+2}\, dr$$

وبناء على العلاقات المذكورة سابقا يمكننا كتابة المساواة الأخيرة بالشكل التالى :

$$\langle r^{-\nu}\rangle = C^2_{nl}\left(\frac{na_0}{2Z}\right)^3\left(\frac{na_0}{2Z}\right)^{-\nu}\int_0^\infty \rho^{-\nu+1}\,(-1)^\kappa\Big\{\rho^\kappa - \kappa\,(\kappa+2l+1)\,\rho^{\kappa-1} + \dots$$

$$\dots + (-1)^{\kappa-2}\,\frac{\kappa\,(\kappa-1)\,(2l+\kappa+1)!}{2!\,(2l+3)!}\,\rho^2 + (-1)^{\kappa-1}\,\frac{\kappa\,(2l+\kappa+1)!}{(2l+2)!}\,\rho +$$

$$+ (-1)^\kappa\,\frac{(2l+\kappa+1)!}{(2l+1)!}\Big\}\,\frac{d^\kappa}{d\rho^\kappa}\left(e^{-\rho}\rho^{\kappa+2l+1}\right)\,d\rho$$

فإذا فرضنا أن $\nu = 1, 2, 3, 4$ فى هذه العلاقة ثم طبقنا من جديد نظرية المشتقات نجد بعد اجراء بعض العمليات غير المعقدة ما يلى :

$$\langle r^{-1}\rangle = \left(\frac{Z}{a_0}\right)\frac{1}{n^2}, \quad \langle r^{-2}\rangle = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^2\frac{1}{n^3\,(l+1/2)}$$

$$\langle r^{-3}\rangle = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3\frac{1}{n^3 l\,(l+1/2)\,(l+1)} \qquad (12.40a)$$

$$\langle r^{-4}\rangle = \frac{1}{2n^5}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^4\frac{3n^2 - l\,(l+1)}{(l-1/2)\,l\,(l+1/2)\,(l+1)\,(l+3/2)}$$

وهنا عند حساب $\langle r^{-1}\rangle$ يجب أن نبقى من كثير الحدود Q^s_k أعلى حد فيه ρ^k . وعند حساب $\langle r^{-2}\rangle$ يجب على العكس أن نبقى آخر حد فيه ρ^0 أما عند حساب $\langle r^{-3}\rangle$ فيجب أن نبقى الحدين الآخرين وهكذا . . . وقد حصلنا على $\langle r^{-3}\rangle$ و $\langle r^{-4}\rangle$ بفرض أن $l \neq 0$ أما فى الحالة s ($l = 0$) فسيظهر تأثير تماسى متبادل عوضا عن التأثير المتبادل المتناسب مع الحدود المتشابهة .

ويمكننا الآن أن نحسب طيف طاقة الذرات الشبيهة بالهيدروجين من

---

* ومن السهل البرهان أيضا أن التوابع القطرية تحقق شرط التعامد بالاضافة إلى شرطا التعامد والمعايرة :

$$\int_0^\infty r^2 R_{n'l} R_{nl}\, dr = \delta_{n'n}$$

فإذا لاحظنا أيضا العلاقة (10.68) فيمكن كتابة شرط التعامد والمعايرة للتابع الموجى الكلى لمسألة كبلر :

$$\int \psi_{n'l'm'}\psi_{nlm}\, d^3x = \delta_{m'm}\delta_{l'l}\delta_{n'n}$$

حيث

$$\psi_{nlm} = R_{nl} Y^m_l$$

العلاقتين (12.32) و (12.5) فنجد أن :

$$E_n = -\frac{Z^2 e_0^2}{2a_0 n^2} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \qquad (12.41)$$

ومنه نلاحظ أن عبارة الطاقة هذه تتفق مع العبارة المقابلة (12.18) التى حصلنا عليها فى حالة المدارات الدائرية عندما اعتبرنا أن العدد الكوانتى الرئيسى n يساوى $l + 1$ وأن العدد القطرى n_r يساوى الصفر . وفى الحالة العامة للمدارات الاهليلجية ، تتعلق العبارة العامة للطاقة الكلية (12.41) بعدد كوانتى رئيسى واحد فقط هو $n = l + n_r + 1$ أى أن مجموع العددين الكوانتيين المدارى l والقطرى n_r لا يتعلق بالعدد الكوانتى المغناطيسى m بينما يرتبط التابع الموجى $\psi_{nlm} = R_{nl} Y_l^m$ بكل الأعداد الكوانتية n و l و m وبالتالى ستكون سويات الطاقات منطبقة وفقا لنظرية شرودينجر الموجية وبما أن m يتغير من $-l$ إلى $+l$ آخذا $2l+1$ قيمة فإن درجة الانطباق ستساوى :

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

بعد ملاحظة أن l تتحول من الصفر إلى $n-1$. كما ويميز الانطباق بالعدد m كل الحركات فى الحقل المركزى وهو مرتبط بتساوى كافة الاتجاهات المارة من مركز الاحداثيات أما الانطباق بالعدد الكوانتى المدارى l فيحصل فى نظرية شرودينجر فى حالة واحدة فقط هى حالة التأثير الكولونى البحت ، أما فى الجمل المتناظرة الأخرى فيختفى الانطباق بـ l أى تنقسم سوية الطاقة المقابلة إلى n سوية جزئية تقابل قيم l المختلفة* . فإذا وقعت الجملة بالاضافة إلى ذلك فى حقل خارجى (مغناطيسى مثلا) ينزع التناظر

---

* سنرى فيما بعد أن أخذ التأثيرات النسبية وحجم النواة ، أو ما يسمى التعميمات الفراغية ، بعين الاعتبار ينزع الانطباق فى ذرة الهيدروجين بالعدد الكوانتى l وبطريقة مشابهة نرى أن تفاعل الالكترونات فى الطبقات الداخلية يفك الانطباق بـ l فى طيف ذرات المعادن القلوية التى لها الكترون واحد على الطبقة الخارجية .

المركزى فإن الانطباق بـ m يزول أيضا وتنقسم السوية الطاقوية إلى n^2 سوية جزئية مختلفة .

د) دراسة الانطباق بـ l فى الحقل الكولونى . ان للانطباق بالعدد l فى الحقل الكولونى (من وجهة النظر الرياضية) مؤثرا آخر أيضا ε نسميه متجه التباعد المركزى ، وهو فى حد ذاته تكامل للحركة ويتبادل مع L^2 ، ويكتب فى التقريب الكلاسيكى بالصيغة التالية :

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 \qquad (12.42)$$

حيث

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{Ze_0^2 m_0}[Lp], \quad \varepsilon_2 = \frac{r}{r}, \quad L = [rp] \qquad (12.43)$$

فإذا أخذنا بعين الاعتبار أنه فى التقريب الكلاسيكى يكون :

$$\dot{L} = 0, \quad \dot{p} = m_0 \dot{v} = -\frac{Ze_0^2}{r^3} r \qquad (12.44)$$

نحصل على :

$$\frac{d\varepsilon_1}{dt} = \frac{1}{Ze_0^2 m_0}[L\dot{p}] = -\frac{[Lr]}{m_0 r^3} \qquad (12.45)$$

وبنفس الطريقة تماما نجد أن :

$$\frac{d\varepsilon_2}{dt} = \frac{\dot{r}r^2 - r(\dot{r}r)}{r^3} = \frac{[Lr]}{m_0 r^3} \qquad (12.45a)$$

ومنه نستخلص قانون مصونية متجه التباعد المركزى :

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{d\varepsilon_1}{dt} + \frac{d\varepsilon_2}{dt} = 0$$

ولفهم المعنى الفيزيائى للمتجه ε نضرب (12.42) عدديا بالمتجه r وبملاحظة (12.43) نجد :

$$(r\varepsilon) = -\frac{L^2}{Ze_0^2 m_0} + r$$

ومنه

$$r = \frac{\frac{L^2}{Zm_0e_0^2}}{1 - |\varepsilon| \cos \varphi} \qquad (12.46)$$

أى أن القيمة المطلقة (طويلة) للمتجه $\varepsilon \equiv |\varepsilon|$ تلعب دور التباعد المركزى أما المتجه نفسه فهو محمول على المحورالكبير ويتجه من المحرق إلى أبعد نقطة من المسار الاهليلجى . ومن السهل حساب القيمة المطلقة للتباعد المركزى بتربيع المساواة (12.42) ، أى أن :

$$\varepsilon^2 = 1 + \frac{2}{Z^2e_0^4m_0} L^2\left(\frac{p^2}{2m_0} - \frac{Ze_0^2}{r}\right) = 1 + \frac{2L^2E}{Z^2e_0^4m_0}$$

أو

$$\varepsilon = \sqrt{1 + \frac{2L^2E}{Z^2e_0^4m_0}} \qquad (12.47)$$

ويعنى ذلك أنه عندما $E < 0$ سنحصل على مدارات أهليلجية ($\varepsilon < 1$) وعندما $E > 0$ نحصل على قطع زائد ($\varepsilon > 1$) كما نحصل على قطع مكافىء عندما $E = 0$ و $\varepsilon = 1$. ولتعميم متجه التباعد المركزى على الحالة الكوانتية نكتب ε بشكل مؤثر :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_1 + \boldsymbol{\varepsilon}_2 \qquad (12.48)$$

حيث :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1 = \frac{1}{2Ze_0^2m_0}([\mathbf{Lp}] - [\mathbf{pL}]), \quad \boldsymbol{\varepsilon}_2 = \frac{\mathbf{r}}{r} \qquad (12.49)$$

ولنبرهن أن مؤثر متجه التباعد ε يكون مصونا فى الحقل الكولونى عندما نكتب الهاملتونيان بالشكل التالى :

$$\mathrm{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} - \frac{Ze_0^2}{r} \qquad (12.50)$$

وفى الحقيقة إذا اعتبرنا أن القيم الكوانتية تتغير حسب العلاقة :

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \frac{i}{\hbar}(\mathrm{H}\mathbf{L} - \mathbf{L}\mathrm{H}) = 0$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{i}{\hbar}(\mathrm{H}\mathbf{p} - \mathbf{p}\mathrm{H}) = \frac{i}{\hbar}\left(\mathbf{p}\frac{Ze_0^2}{r} - \frac{Ze_0^2}{r}\mathbf{p}\right) = -\frac{Ze_0^2\boldsymbol{r}}{r^3} \quad (12.51)$$

وهذه التغيرات تحصل فى الحالة الكلاسيكية أيضا ، انظر (12.44) وعليه نجد أن

$$\frac{d\varepsilon_1}{dt} = -\frac{1}{2m_0}\left(\left[[\boldsymbol{r}\mathbf{p}]\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\right] - \left[\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}[\boldsymbol{r}\mathbf{p}]\right]\right)$$

وإذا حسبنا العلاقة الأخيرة نستخلص أن :

$$\frac{d\varepsilon_1}{dt} = -\frac{1}{m_0}\left(\frac{1}{r}\mathbf{p} - \frac{\boldsymbol{r}}{r^3}(\boldsymbol{r}\mathbf{p}) - \frac{\hbar}{i}\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\right) \quad (12.52)$$

وبنفس الطريقة تماما نجد أن :

$$\frac{d\varepsilon_2}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left(\mathrm{H}\frac{\boldsymbol{r}}{r} - \frac{\boldsymbol{r}}{r}\mathrm{H}\right) = \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0}\frac{\boldsymbol{r}}{r} - \frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0}\right) \quad (12.53)$$

أو

$$\frac{d\varepsilon_2}{dt} = \frac{1}{m_0}\left(\frac{1}{r}\mathbf{p} - \frac{\boldsymbol{r}}{r^3}(\boldsymbol{r}\mathbf{p}) - \frac{\hbar}{i}\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\right) \quad (12.54)$$

ومن (12.52) و (12.54) ينتج القانون الكوانتى لانحفاظ المؤثر ε

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = 0 \quad (12.55)$$

ولكن مؤثر التباعد المركزى لا يتبادل مع مربع العزم المدارى ، وفى الحقيقة إذا أخذنا مسقط هذا المؤثر على المحور z فنجد أن :

$$\varepsilon_z = \frac{1}{2Ze_0^2m_0}(\mathrm{L}_x\mathrm{p}_y - \mathrm{L}_y\mathrm{p}_x - \mathrm{p}_x\mathrm{L}_y + \mathrm{p}_y\mathrm{L}_x) + \frac{z}{r} \quad (12.56)$$

ومن السهل عندئذ الحصول على قواعد التبادل التالية :

$$\mathrm{L}_x\varepsilon_z - \varepsilon_z\mathrm{L}_x = \frac{\hbar}{i}\varepsilon_y \quad (12.57)$$

$$\mathrm{L}_y\varepsilon_z - \varepsilon_z\mathrm{L}_y = -\frac{\hbar}{i}\varepsilon_x \quad (12.58)$$

$$\mathrm{L}_z\varepsilon_z - \varepsilon_z\mathrm{L}_z = 0 \quad (12.59)$$

ومن هنا ينتج كحالة خاصة أنه بالرغم من تبادل المؤثر مع الهاملنونيان ومسقط العزم L_z فهو لا يتبادل مع L^2 ، أى أن :

$$L^2\varepsilon_z - \varepsilon_z L^2 = -\frac{2\hbar}{i}\left([\varepsilon L]_z + \frac{\hbar}{i}\varepsilon_z\right) \qquad (12.60)$$

وهو ما يؤدى آليا إلى الانطباق بـ l الذى يميز الحركة فى الحقل الكولونى ، طالما أننا لا نستطيع أن ندخل مفهوم المؤثر المحفوظ ε فى حقول القوى المركزية الأخرى . ولنلاحظ أننا نستطيع حل مسألة كبلر فى الاحداثيات القطعية المكافئة لأن المؤثرات L_z, L^2, H (الأعداد الكوانتية n ، l ، m) بالاضافة إلى الاحداثيات الكروية عندما تبقى المؤثرات (H ، ε_z ، L_z) الأعداد الكوانتية n ، λ ، m_1) مصونة . وهذا يعنى من الناحية الفيزيائية امكانية وجود مدارات مختلفة عن بعضها باختلاف قيمة التباعد المركزى ε ، وذلك من أجل قيمة واحدة معينة للطاقة وعندئذ سنحصل على* :

$$\varepsilon^2 = 1 + \frac{2}{Z^2 e_0^4 m_0}(L^2 + \hbar^2)H \qquad (12.61)$$

حيث H - هاملتونيان الجملة ، انظر (12.50) ، وإذا اعتبرنا أن القيم الخاصة لـ H و L^2 فى ذرة الهيدروجين هى على الترتيب :

$$E_n = -\frac{Z^2 e_0^4 m_0}{2\hbar^2 n^2}, \quad L^2 = \hbar^2 l(l+1). \qquad (12.62)$$

فإننا نجد :

$$\varepsilon = \sqrt{1 - \frac{l^2+l+1}{n^2}} \qquad (12.63)$$

ومنه نستنتج أن التباعد المركزى يأخذ نهاية صغرى عندما $l = n-1$ قيمتها

$$\varepsilon_{\min} = \sqrt{\frac{n-1}{n^2}} \qquad (12.64)$$

* لبرهان العلاقة (12.61) يكتب المؤثر (12.48) بالشكل التالى :

$$\varepsilon = \frac{1}{Z e_0^2 m_0}([Lp] - i\hbar p) + \frac{r}{r}$$

وهذا ما يوافق المدارات الدارئرية للنموذج الكلاسيكى ، عندما $n = 1$ (اخفض حالة طاقوية) حيث ينتهى التباعد المركزى إلى الصفر ($\varepsilon = 0$) ، وبما أنه لا يوجد فى هذه الحالة اتجاه متميز للعزم المغناطيسى المدارى (فى الحالة s يكون $l = m = 0$) فإننا نحصل فى الواقع على احتمالات متساوية لتوضع الالكترون على الكرة وستختلف القيمة الصغرى لـ ε عن الصفر عندما $l = n-1 = 1, 2, 3, \ldots$ فى الحالات الكوانتية الأخرى ($n = 2, 3, 4,$) فيما يكون اتجاه المسار ضمن زاوية مجسمة ما مميزة بالعدد الكوانتى m.

ﻫ) قوانين الاصطفاء (الانتقاء) وطيف اشعاع الذرات الشبيهة بالهيدروجين . لمعرفة قوانين الاصطفاء فى مسألة كبلر ينبغى حساب العناصر التالية :

$$\langle n'l'm' \mid r \mid nlm\rangle = \int \psi^*_{n'l'm'} r \psi_{nlm}\, d^3x \qquad (12.65)$$

وإذا عوضنا $\psi_{nlm} = Y_l^m R_{nl}$ فإننا نجد أن :

$$\langle n'l'm' \mid r \mid nlm\rangle = \oint d\Omega\, (Y_{l'}^{m'})^* \frac{r}{r}\, Y_l^m \int_0^\infty R_{n'l'} r^3 R_{nl}\, dr \qquad (12.66)$$

حيث يعطى التكامل بالنسبة للزاويتين ϑ ، φ ، انظر (11.24) ، (11.25) ، (11.26) ، قوانين انتقاء العدد الكوانتى المدارى $\Delta l = l - l' = \pm 1$ والعدد الكوانتى المغناطيسى $\Delta m = m - m' = 0 \pm 1$ وإذا استفدنا من ذلك نحصل بدلا من (12.66) على ما يلى :

$$\langle n'l'm' \mid r \mid nlm\rangle = \text{const} \begin{Bmatrix} \delta_{m'm} \\ \delta_{m',\, m\pm 1} \end{Bmatrix} \delta_{l',\, l\pm 1} \int_0^\infty R_{n',\, l\pm 1} r^3 R_{nl}\, dr \qquad (12.67)$$

ولكن إذا حسبنا التكامل ($k = n$) فإننا نجد أن :

$$\int_0^\infty r^3 R_{n'l'} R_{nl}\, dr \sim \int_0^\infty r^{3+2l\pm1} e^{-\frac{Zr}{a_0}\left(\frac{1}{n}+\frac{1}{n'}\right)} Q_\kappa^l\left(\frac{2Zr}{na_0}\right) Q_\kappa^{l\pm1}\left(\frac{2Zr}{n'a_0}\right) dr \tag{12.68}$$

ومن السهل البرهان أن هذا التكامل لا ينعدم مهما كانت قيمة n' أى أنه يمكن للعدد الكوانتى الرئيسى أن يتغير بصورة اختيارية فى كافة الانتقالات الممكنة . ويعبر عن هذا التكامل فى الحالة العامة بواسطة التوابع الهندسية المتسامية وبصورة خاصة يمكن البرهان على أنه عندما ينتقل الالكترون إلى أخفض سوية طاقة $1s$ ، سلسلة (نطاق) لايمن ، سيكون لدينا :

$$\int_0^\infty r^3 R_{10} R_{n1}\, dr = \frac{2^8 n^7 (n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}}\, a_0. \tag{12.69}$$

من هنا نرى أنه لا يمكن لهذا التكامل أن ينعدم مهما كانت قيم $n = 2, 3, 4, \ldots$.

وإذا أخذنا بعين الاعتبار قانون الاصطفاء للذرة الشبيهة بالهيدروجين يمكن الانتقال إلى دراسة طيف الاشعاع . وهنا نفرض بعض الاصطلاحات المتعلقة بالسويات الطاقوية للذرة ، سنرمز أولا للحدود الطيفية للذرات $(-E_{nl}/\hbar)$ التى لا تتبع فى الحالة العامة ، لـ n وإنما لـ l أيضا ، بالرمز (nl) أى أن :

$$\left(-\frac{E_{nl}}{\hbar}\right) = (nl) \tag{12.70}$$

حيث $n = 1, 2, 3, \ldots$ أما l فقد أشرنا سابقا فى البند ١١ أنها تأخذ الحروف $s, p, d, f, g, h, \ldots$ الموافقة لـ $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \ldots$ وبما أن $l \leqslant n-1$ يمكن أن نكتب فقط الرموز التالية :

$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, 5s, 5p, 5d, 5f, 5g, \ldots$

ولا يمكن أن نجد $1p$ لأن $n = 1; l = 1$ ولا $3f$ لأن $n = l = 3$ وهكذا ، أما تواتر الاشعاع فيكتب فى هذه الرموز بالشكل التالى :

$$\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} = (n'l') - (nl) \qquad (12.71)$$

ومن الضرورى هنا اعتبار قانون الانتقاء للعدد وهو : $l : l' = l \pm 1$ وإذا استفدنا من العلاقة (12.41) فيمكن كتابة الرمز (nl) بالشكل التالى :

$$(nl) = \frac{m_0 e_0^4}{2\hbar^3} \frac{Z^2}{n^2} = \frac{RZ^2}{n^2} \qquad (12.72)$$

حيث R ثابت ريدبرج الذى يعطى بالعلاقة التالية :

$$R = \frac{m_0 e_0^4}{2\hbar^3} \qquad (12.73)$$

أما تواتر الاشعاع $\omega_{nn'}$ فيحسب بالعلاقة الآتية :

$$\omega_{nn'} = RZ^2 \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \qquad (12.74)$$

ومن هنا نرى أنه للحصول على سلسلة لايمن فى حالة ذرة الهيدروجين ($Z = 1$) ، هذه السلسلة التى تقابل الانتقال إلى أخفض سوية طاقوية $n' = 1$ أى إلى السوية $1s$ ، (الشكل ١٢ ـ ٤) ، نستعمل العلاقة :

$$\omega_{\text{Lym}} = (1s) - (np) = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \qquad (12.75)$$

حيث $n = 2, 3, 4, \ldots$ أما من أجل سلسلة بالمير الموافقة للانتقال إلى السوية $n' = 2$ من السويات $n > 2$ فنجد ثلاثة تواترات ممكنة*

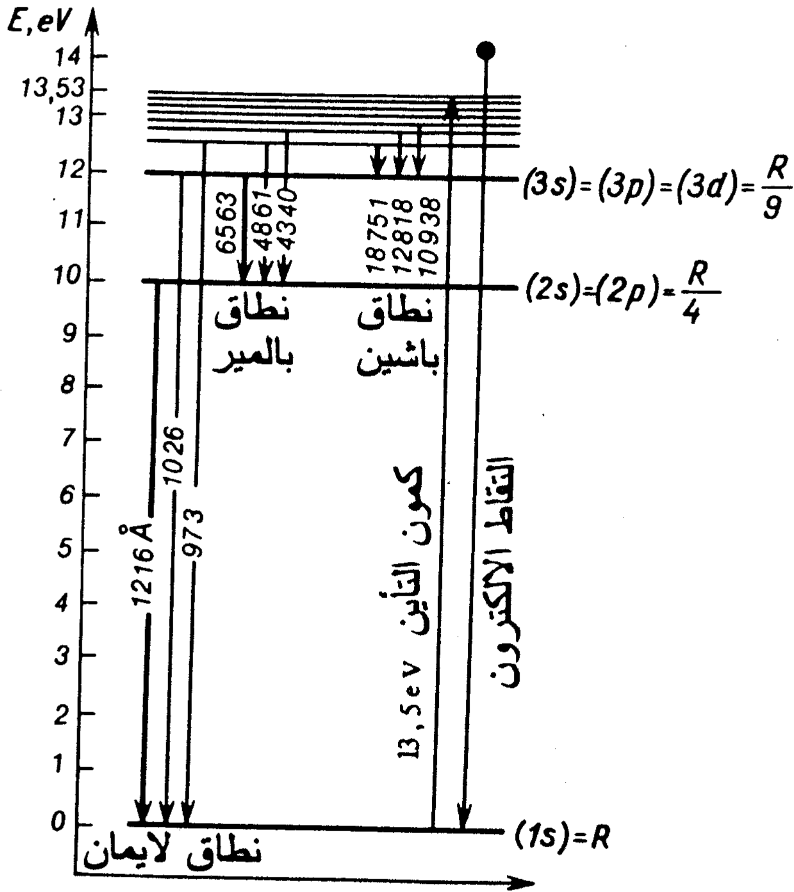
---

* لحساب احتمال الانتقال الثنائى $np \to 1s$ نجد طبقا لـ (9.95) أن :

$$A_{n1} = Z^4 \left(\frac{e_0^2}{c\hbar} \right)^5 \frac{m_0 c^2}{2\hbar} \frac{2^8}{9} \frac{n (n-1)^{2n-2}}{(n+1)^{2n+2}}$$

أى أن زمن حياة ذرة الهيدروجين ($Z = 1$) فى الحالة $2p$ يساوى :

$$\tau = \frac{1}{A_{21}} \approx 1{,}6 \cdot 10^{-9}\text{c}$$



الشكل ١٢ ـ ٣ . النطاقات (السلاسل) الطيفية لذرة الهيدروجين ، أطوال الموجات المقابلة للانتقالات المبينة مقدرة بال Å .

$$\begin{aligned} \omega'_{Balm} &= (2s) - (np) \\ \omega''_{Balm} &= (2p) - (ns) \\ \omega'''_{Balm} &= (2p) - (nd) \end{aligned} \qquad (12.76)$$

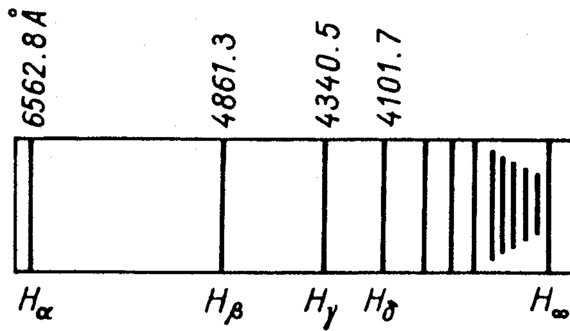
وسبب الانطباق بالعدد الكوانتى المدارى فى حالة ذرة الهيدروجين هو أن الخطوط الطيفية الثلاثة تتحد بخط واحد هو التالى :

$$\omega_{Balm} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

ونحصل على ما يشبه ذلك فى سلسلة باشن

$$\omega_{Pash} = R\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

حيث $n = 4, 5, 6, ...$ ويمثل الشكل (١٢ ـ ٣) رسما تخطيطيا للخطوط الطيفية لذرة الهيدروجين (بالأخذ بنظر الاعتبار السويات المتقطعة والطيف المستمر) . ويظهر بوضوح من هذا الرسم ، الانطباق بـ l الذى يبدو فى اتحاد كل الخطوط الطيفية ذات القيمة لـ n بخط وحيد .



الشكل ١٢ ـ ٤ . نطاق بالمبر الطيفى ، أطوال الموجات المقابلة للخطوط المرئية H_α و H_β و H_γ و H_δ مقدرة بـ ($\mathring{A}$) و H_∞ يعطى التوضح النظرى لحدود النطاق .

وبالاضافة إلى الانتقالات العادية بين السويات المتقطعة فى الذرة ، من الممكن حدوث نوعين متعاكسين من العمليات هما التأين والأسر ففى عملية التأين ينتقل الالكترون من الطيف المتقطع ($E < 0$) من أخفض حالة مثلا إلى مجال الطاقات الموجبة ($E > 0$) التى تؤلف طيفا مستمرا (مسارات دائرية) ويرافق هذه العملية امتصاص للطاقة . وعلى العكس من ذلك نرى فى حالة الأسر حيث ينتقل الكترون إلى إحدى السويات المتقطعة الممكنة منتجا بذلك الطاقة المناسبة ولكى ينتقل من أخفض سوية طاقة ($n = 1$) فى المجال $E > 0$ ، لا بد من صرف طاقة (الشكل ١٢ ـ ٣) .

$$E^{ion} = T - E_1 = R\hbar + T$$

حيث — $T = \frac{m_0 v^2}{2}$ هى الطاقة الحركية للالكترون وهى غير مرتبطة عمليا بالنواة وتعين الطاقة E^{ion} ما يسمى بطاقة تأين (تشرد) الذرة ، أما أصغر تأين هو من أجل $T = 0$ وهو ما يقابل انتقال الالكترون من السوية $n = 1$ إلى حالة الطيف المستمر بطاقة صغرى $(E = 0)$ بحيث يستطيع الالكترون مغادرة النواة . وإذا حسبنا هذه الطاقة فى حالة ذرة الهيدروجين فإننا نجد

$$E^{ion}_{min} = R\hbar = \frac{e_0^2}{2a_0} = 13,5 \ eV$$

و) **اعتبار حركة النواة** . لقد اجرينا كل الحسابات حتى الآن بدون اعتبار حركة النواة ولهذا ستكون النظرية المعطاة سابقا صحيحة فقط فى تلك الحالة عندما تكون كتلة النواة كبيرة جدا ويمكن قبول هذا ، بصورة عامة ، كتقريب أول وخصوصا فى حالة النوى الخفيفة (الهيدروجين والهليوم مثلا) ولقد أدى اعتبار حركة النواة إلى فهم مجموعة حقائق تجريبية . فيمكن كتابة الهاملتونيان لجملة مؤلفة من جسمين هما النواة والالكترون ، عند اعتبار حركة النواة بالشكل :

$$H = \frac{1}{2m_0} p_1^2 + \frac{1}{2M} p_2^2 + V(|r_1 - r_2|) \qquad (12.77)$$

حيث m_0 و M كتلتا كل من الالكترون والنواة على الترتيب r_2 ، r_1 احداثياتهما . وترتبط طاقة التأثير المتبادل للالكترون بالنواة بنصف القطر النسبى - المتجه $V(|r_1 - r_2|)$

$$r = r_1 - r_2$$

وليكن متجه مركز كتلة الجملة بالشكل التالى :

$$R = \frac{m_0 r_1 + M r_2}{m_0 + M}$$

ثم لننتقل من المتحولات $r_1, r_2, p_1 = -i\hbar\nabla_1, p_2 = -i\hbar\nabla_2$ إلى احداثيين جديدين R ، r واندفاعين $p = -i\hbar\nabla_r, p_{cm} = -i\hbar\nabla_R$ ولهذا كان من الضرورى استعمال القواعد المعروفة لتفاضل تابع مركب ، فمثلا :

$$\frac{\partial}{\partial x_1}\psi = \frac{\partial r}{\partial x_1}\nabla_r\psi + \frac{\partial R}{\partial x_1}\nabla_R\psi$$

وهكذا . . . وعندئذ نكتب معادلة شرودينجر فى الاحداثيات الجديدة بالشكل :

$$\left(\frac{1}{2_{red}} p^2 + \frac{1}{2(m_0 + M)} p^2 + V(r) - E\right)\psi = 0 \quad (12.78)$$

حيث تعطى الكتلة المختزلة بالمساواة :

$$\frac{1}{m_{red}} = \frac{1}{m_0} + \frac{1}{M}$$

أى أن.

$$m_{red} = \frac{m_0 M}{M + m_0} \simeq m_0\left(1 - \frac{m_0}{M}\right) \quad (12.79)$$

ان التابع الموجى المحقق للمعادلة (12.78) يمكن كتابته بشكل الجداء $\psi = \psi(r)\psi(R)$ ، حيث تصف $\psi(R)$ الحركة الحرة لمركز الكتلة :

$$\psi(R) = \text{const}\, e^{ip_{cm} R/\hbar}$$

فإذا فرضنا مركز الكتلة ثابتا أى p_{cm} فإننا نجد لحساب التابع $\psi(r)$ الذى يصف الحركة النسبية المعادلة التالية :

$$\left(\frac{p^2}{2m_{red}} + V(r) - E\right)\psi(r) = 0 \quad (12.80)$$

ويمكن اختلاف هذه المعادلة عن المعادلة المقابلة لها التى تصف ذرة الهيدروجين فى تبديل كتلة السكون للالكترون أى m_0 بالكتلة المختزلة m_{red} . ولهذا نحصل على عبارة الخطوط الطيفية نفسها والتى حصلنا

عليها عندما اعتبرنا النواة ساكنة بتبديل ثابت ريدبرغ $R = R_\infty = \frac{m_0 e_0^4}{2\hbar^3}$ المقابل لكتلة نواة محدودة M ، أى أن :

$$R_M = \frac{m_{red} e_0^4}{2\hbar^3} \approx R_\infty \left(1 - \frac{m_0}{M}\right) \qquad (12.81)$$

وفى هذه الحالة يتغير قليلا الرمز (nl) :

$$(nl) = \frac{Z^2 R_\infty}{n^2}\left(1 - \frac{m_0}{M}\right) \qquad (12.82)$$

ولهذا سيحسب تواتر الاشعاع بالعلاقة :

$$\omega_{nn'} = Z^2 R_\infty \left(1 - \frac{m_0}{M}\right)\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (12.83)$$

التى تختلف عن السابقة ، انظر (12.74) ، بوجود المضروب

$$\left(1 - \frac{m_0}{M}\right)$$

ويمكن حساب كتلة النواة M بطرائق طيفية ، بالاضافة إلى الطرائق الكيميائية المعروفة ، طالما أن الكتلة M تتعلق بالتواتر . وبفضل ذلك أمكن البرهان بصورة خاصة على وجود الهيدروجين الثقيل وذرات الهيليوم المتأينة وهكذا . ومن المعلوم أن حساب الوزن الذرى للهيدروجين يتم وسطيا بالنسبة للأوكسجين على أساس كيميائى ، أما الوزن الذرى لكل ذرة فقد حسب بواسطة مطياف الكتلة . وهكذا أمكن الحصول على قيمة تختلف قليلا عن الأولى حسب العلاقة :

$$\frac{M_{ch} - M_{sp}}{M_{ch}} \cdot 100\% \cong 0{,}0145\% \qquad (12.84)$$

وبناء على ذلك فرض العالمان بيرج ومينتسل وجود نظير آخر للهيدروجين هو الديتريوم $D = {}^2_1H$ أو الهيدروجين الثقيل الذ ى وزنه الذرى أكبر بمرتين من الهيدروجين العادى ، وفى الحقيقة أنه عند حساب الوزن الذرى

لخليط طبيعي من الهيدروجين لابد أن يحسب فيه الديتريوم أيضا أما في مقياس الطيف الكتلي فيقاس فقط الوزن الذرى $^{1}_{1}H$ لأن الخطوط الطيفية للذرات $^{2}_{1}H$ تقع في مكان آخر من السلم .

وكما هو الحال بالنسبة للهيدروجين يمكن للديتريوم أن يدخل في تفاعل ينتج مثلا الماء الثقيل D_2O وقد اكتشف الماء الثقيل أولا من قبل جورى وأسبورن عام ١٩٣٢ . وأن الطريقة الأساسية للحصول على الديتريوم هي الطريقة الكهربائية لتحليل الماء حيث تكون سرعة توضع الهيدروجين على المهبط أكبر بكثير من سرعة توضع الديتريوم ونتيجة لذلك يحدث تكاثف للديتريوم في بقايا الماء المحلل ويمكن كشفه بسهولة هناك ومن الصعب اكتشاف الهيدروجين الثقيل في الماء الطبيعي بسبب ضآلة هذه الكمية ، ولكننا نستطيع التأكد من وجود الديتريوم بواسطة الأبحاث الطيفية التي برهنت أنه يوجد في سلسلة بالمير $(n' = 2)$ بالاضافة إلى الخطوط الطيفية

$$\omega_H^{\text{Balm}} = R_\infty \left(1 - \frac{1}{1840}\right)\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (12.85)$$

توجد خطوط أخرى متوضعة ، الشكل (١٢ ـ ٥) ، إلى اليمين قليلا ويمكن أن توصف بالعلاقة* .

$$\omega_D^{\text{Balm}} = R_\infty \left(1 - \frac{1}{3680}\right)\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (12.86)$$

التي ليس من الصعب الحصول عليها من (12.83) إذا جعلنا الكتلة M تساوى ضعف كتلة ذرة الهيدروجين وبدلنا Z بـ 1 . والجدير بالذكر أن

* طبقا للمعطيات التجريبية يكون :

$$R_\infty = 2\pi c \cdot 109\,737$$
$$R_H = 2\pi c \cdot 109\,678$$
$$R_D = 2\pi c \cdot 109\,707$$

الهيدروجين (^{1}H)

الديتيريوم (^{2}H)

التريتيوم (^{3}H)

الشكل ١٢ ـ ٥ . مخطط التوزيع النسبى للخطوط الطيفية لذرة الهيدروجين ونظائره .

الاختلاف النسبى الكبير بين كتلتى الهيدروجين والديتريوم يسبب اختلافا فى خواصهما الفيزيائية والكيميائية أكثر بكثير من نظائر العناصر الأخرى ، فمثلا نرى أن الماء الثقيل يبدو مشابها بشكله الخارجى للماء العادى إلا أنه يختلف عنه فيزيائيا ، فالماء الثقيل يتجمد ويغلى فى الدرجتين 3,81 °C و 101,4 °C على الترتيب وله لزوجة كبيرة ، ولقد اكتسب الماء الثقيل أهمية خاصة مع تطور الفيزياء النووية لأنه يعد مبطئا جـيدا للنترونات السريعة ، كما يستعمل كمصدر لانتاج الديتريوم . وقد اكتشف فى المدة الأخيرة نظير آخر للهيدروجين هو التريتيوم الذى تتألف نواته من نترونين وبروتون واحد . ويؤلف عند اتحاده مع الأوكسجين ما يسمى بماء التريتيوم . أما نسبة عدد ذرات التريتيوم إلى عدد ذرات الهيدروجين $^{1}_{1}H$ فتساوى تقريبا 10^{-18} بينما تساوى النسبة عدد ذرات الديتريوم إلى عدد ذرات الهيدروجين $^{1}_{1}H$ فى الماء الطبيعى 1/6800 . وتعتبر خليطة التريتيوم مع الديتريوم ذات أهمية خاصة لتحقيق التفاعل النووى الحرارى .

تزاح الخطوط الطيفية للتريتيوم بالنسبة لمثيلاتها للهيدروجيـن

والديتريوم ، الشكل (١٢ - ٥) ، وهى تحسب بالعلاقة :

$$\omega_T^{\text{Balm.}} = R_\infty\left(1-\frac{1}{5520}\right)\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n^2}\right) \qquad (12.87)$$

وقد كان من النتائج الأخرى المهمة جدا لحركة النواة هو اكتشاف ذرة الهليوم المؤينة التى اكتشفت لأول مرة بطريقة طيفية على الشمس فعند دراسة طيف الشمس لوحظت سلسلة خطوط متوضعة حسب القانون :

$$\omega_{2n_1} = R\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n_1^2}\right) \qquad (12.88)$$

حيث تأخذ n_1 القيم :

$$n_1 = {}^5/_2,\ 3,\ {}^7/_2,\ 4,\ {}^9/_2,\ \ldots \qquad (12.89)$$

ان.هذه السلسلة هى فى الحقيقة سلسلة بالمير الهيدروجينية $(n_1 = 3,4,5,\ldots)$ ويفصل بينها صف من الخطوط تؤلف سلسلة سميت بسلسلة بيكرينغ المتميزة باعداد كوانتية نصف صحيحة $n_1 = {}^5/_2, {}^7/_2, {}^9/_2,\ldots$ ولفهم سلسلة بيكرينغ ، فرض فى البداية ، امكانية وجود الهيدروجين على الشمس فى حالة خاصة وبسبب ذلك يمكن للعدد الكوانتى أن يأخذ قيما نصف صحيحة ، ولكن ثبت فيما بعد أن الخطوط التجريبية تنحرف نحو اليمين أكثر مما ينتج بالعلاقة (12.85) ولهذا أهمل هذا الفرض ، وبعدئذ اقترحت فرضية أخرى تقول أنه الطيف المكتشف ناتج عن ذرة الهليوم المؤينة مرة واحدة $^4_2He^+$ التى كتلة نواتها $M = 7360\ m_0$ وشحنتها $Z = 2$ أما التواتر فيحسب طبقا لـ (12.83) بالعلاقة :

$$\omega_{He} = 2^2 R_{He}\left(\frac{1}{n'^2}-\frac{1}{n^2}\right) \qquad (12.90)$$

فإذا فرضنا $n' = 4$ فيمكن تحويل (12.90) إلى الشكل :

$$\omega_{He} = R_{He}\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{\left(\frac{n}{2}\right)^2}\right) \qquad (12.91)$$

حيث $n = 5, 6, 7\ 8, \ldots$. ولقد كان من الضرورى حساب ثابت ريدبرغ تجريبيا بغية الاجابة على السؤال التالى : هل تنتج سلسلة بيكرينغ عن اشعاع ذرات الهيدروجين (بفرض أن الاعداد الكوانتية تستطيع أن تأخذ قيما نصف صحيحة) أو عن اشعاع ذرة الهليوم المؤينة (قيم عادية للأعداد الكوانتية)؟ فى حالة الهيدروجين يكون الثابت المذكور :

$$R_{\mathrm{H}} = R_{\infty}\left(1 - \frac{1}{1840}\right) \qquad (12.92)$$

$$R_{\mathrm{He}} = R_{\infty}\left(1 - \frac{1}{7360}\right) \qquad (12.93)$$

ولقد أكدت الأبحاث الدقيقة فى هذا الصدد صحة العلاقة (12.93) التى تعطى ثابت ريدبرغ للهليوم ، وبالتالى تم البرهان بصورة قاطعة أن سلسلة بيكرينغ هى طيف ذرة الهليوم المؤينة .

ز) **ذرة الهيدروجين فى التقريب شبه الكلاسيكى** . من الممكن كتابة معادلة القسم القطرى لذرةالهيدروجين ، انظر (12.4) ، فى حالة المدارات الاهليلجية $(E < 0)$

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left(-A + \frac{2B}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u = 0 \qquad (12.94)$$

حيث $u = rR_l$ أما A و B فهما كما فى (12.5) . وبما أن شذوذ المعادلة (12.94) عندما $r \to 0$ والمعين بالحد $\frac{l(l+1)}{r^2}$ ، يقع بالقرب من حاجز الكمون فإن اجراء عملية الاندماج، طبقا للتابعين $U(\xi), V(\xi)$ ، انظر البند ٥ ، لا يمكن أن يعطى نتيجة جديدة لأنه لا يمكن فى المجال $r \to 0$ أن يتقارب هذين التابعين ولهذا نحاول ابعاد هذا الشذوذ من النقطة $r \to 0$ إلى النقطة $x \to -\infty$ وذلك بفرض متحول جديد حسب العلاقة $r = e^x$

وإذا انتقلنا إلى المتحول x بواسطة التحويل $r = e^x$ وفرضنا تابعا موجبا جديدا

$$u = e^{x/2}\chi(x)$$

فإننا نرى أن المعادلة (12.94) تتحول إلى الشكل التالى :

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} + e^{2x}\left(-A + 2Be^{-x} - (l+{}^1\!/_2)^2 e^{-2x}\right)\chi = 0 \quad (12.95)$$

وبتطبيق تقريب WKB وبواسطة الصيغة (5.39) نستطيع حساب طيف القيم الخاصة

$$\int_{x_1}^{x_2} e^x\left(-A + 2Be^{-x} - (l+{}^1\!/_2)^2 e^{-2x}\right)^{1/2} dx = \pi(n_r + {}^1\!/_2) \quad (12.96)$$

حيث $n_r = 0, 1, 2, \ldots$ العدد الكوانتى القطرى . فإذا عدنا إلى المتحول القديم $r = e^x$ نجد فى التكامل السابق أن :

$$\int_{r_1}^{r_2}\left(-A + \frac{2B}{r} - \frac{(l+{}^1\!/_2)^2}{r^2}\right)^{1/2} dr = \pi(n_r + {}^1\!/_2) \quad (12.97)$$

حيث r_1 و $r_2 > r_1$ جذور التابع المستكمل . وإذا حسبنا التكامل الأخير (بدقة) فإننا نجد :

$$\pi\left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - {}^1\!/_2\right) = \pi(n_r + {}^1\!/_2) \quad (12.98)$$

ولنعوض هنا عن A و B بقيمتهما من (12.5) ونستفيد من تعريف العدد الكوانتى الرئيسى $n = l + n_r + 1$ وعندئذ نحصل على العلاقة نفسها التى حصلنا عليها سابقا فى نظرية شرودينجر ، انظر (12.32) ، لحساب طيف الطاقة وهى :

$$\hbar\frac{B}{\sqrt{A}} = \frac{\sqrt{m_0}\,Ze_0^2}{\sqrt{-2E}} = \hbar n$$

وليست هذه النتيجة مجرد صدفة ، طالما أننا نحصل فى نظرية شرودينجر على السويات الكوانتية فى حدود متناسبة مع $\hbar$ بينما تسمح الطريقة شبه الكلاسيكية بحسابها بدقة . هذا ويمكن استخلاص نتيجة هامة من (12.97) وهى أنه من الضرورى عند استعمال العبارات شبه الكلاسيكية فى الحقول المركزية ، اجراء التغيير التالى فى العزم المدارى :

$$l(l+1) \rightarrow (l+{}^1/_2)^2 \qquad (12.99)$$

البند ١٣ ـ ذرة الهيدروجين فى الحقل الكهربائى

إذا وضعنا ذرة فى حقل كهربائى خارجى ثابت فإن خطوطها الطيفية ستنقسم ، وقد لاحظ شتارك هذه الظاهرة تجريبيا فى عام ١٩١٣ من أجل ذرة الهيدروجين ، وسندرس فى هذا البند النظرية الكوانتية لظاهرة شتارك لذرة الهيدروجين . يحصر الحقل الكهربائى اتجاها معينا فى الفراغ ، ولهذا من الأسهل البحث عن حل لمعادلة شرودينجر فى الاحداثيات (القطعية المكافئة) ، لا فى الكروية ، كما فى البند ١٢ . لندرس أولا حل معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين عند فصل المتحولات فى الاحداثيات القطعية .

أ) تكميم ذرة الهيدروجين فى الاحداثيات القطعية . قبل كل شىء يحدث الانطباق فى العدد الكوانتى l فى الحقل الكولونى لأنه يجوز فصل المتحولات فى معادلة شرودينجر فى الاحداثيات الكروية ، كما يحدث فى أى حقل مركزى ، وفى الاحداثيات القطعية المكافئة أيضا ، وهذه الامكانية خاصة بالحقل الكولونى . فإذا كانت لدينا ثلاثة مؤثرات فى الاحداثيات الكروية H و L^2 و L_z تعين توابعها الخاصة جملة حالات تامة لذرة الهيدروجين ، فيمكن اختيار ثلاثة مؤثرات أخرى H و ε_z و L_z فى الاحداثيات القطعية تتبادل فيما بينها طبقا لـ (12.55) و (12.59) ولهذا ستكون مصونة . ومن الطبيعى أن الجملة التامة الجديدة لن تتطابق مع

السابقة بسبب عدم تبادل L^2 مع ε_z . وللبحث عن التوابع الخاصة للمؤثرات H و ε_z و L_z نكتب معادلة شرودينجر للالكترون فى حقل الذرة الكولونى التالى :

$$V = -\frac{Ze_0^2}{r} = -\frac{2Ze_0^2}{\xi + \eta} \qquad (13.1)$$

ولنكتب هذه المعادلة فى الاحداثيات القطعية مستفيدين من عبارة اللا بلاسيان (10.16) المحسوبة فى البند ١٠ كما يلى :

$$\frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E + \frac{2Ze_0^2}{\xi + \eta}\right)\psi + \left\{\frac{4}{\xi + \eta}\left[\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi}\right) + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \frac{\partial}{\partial \eta}\left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta}\right)\right] + \frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right\}\psi = 0 \qquad (13.2)$$

وإذا فصلنا المتغيرات

$$\psi(\xi, \eta, \varphi) = f_1(\xi) f_2(\eta) \Phi(\varphi) \qquad (13.3)$$

نجد لحساب التوابع Φ و f_1 و f_2 المعادلات التالية :

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2\Phi$$
$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi \frac{df_1}{d\xi}\right) + \left[-\frac{A}{4}\xi - \frac{m^2}{4\xi} + B_1\right] f_1 = 0 \qquad (13.4)$$
$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta \frac{df_2}{d\eta}\right) + \left[-\frac{A}{4}\eta - \frac{m^2}{4\eta} + B_2\right] f_2 = 0$$

حيث تعطى A كما فى (12.5) بالشكل التالى :

$$A = -\frac{2m_0E}{\hbar^2} \qquad (13.5)$$

أما m^2 و B_1 و B_2 فهى ثوابت الفصل ، وكذلك :

$$B_1 + B_2 = B = \frac{m_0Ze^2}{\hbar^2} \qquad (13.6)$$

ان حل المعادلة الأولى من هذه المجموعة هو :

$$\Phi(\varphi) = e^{im\varphi} \qquad (13.7)$$

وهى التوابع الخاصة للمؤثر L_z عندما يكون $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$ أما المعادلتان الباقيتان فبعد التبديل اللاحق للمتغيرات :

$$\rho_1 = \sqrt{A}\,\xi, \quad \rho_2 = \sqrt{A}\,\eta \qquad (13.8)$$

وبفرض أن :

$$\beta_1 = \frac{B_1}{\sqrt{A}}, \quad \beta_2 = \frac{B_2}{\sqrt{A}}, \quad \beta_1 + \beta_2 = \frac{B}{\sqrt{A}} \qquad (13.9)$$

فستكتبان كما يلى :

$$\frac{d^2 f_1}{d\rho_1^2} + \frac{1}{\rho_1}\frac{df_1}{d\rho_1} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\beta_1}{\rho_1} - \frac{m^2}{4\rho_1^2}\right] f_1 = 0 \qquad (13.10)$$

وبالطريقة نفسها نحصل على معادلة مشابهة للتابع $f_2(\rho_2)$ بالوسيط β_2 . ولنفرض أولا $m \geqslant 0$ ، ونتبع الخطوات نفسها التى اتبعناها فى (12.7) ، فنبحث عن حلين تقاربيين عندما $\rho_1 \to \infty$ و $\rho_1 \to 0$ حيث نجد أخيرا أن :

$$f_1(\rho_1) = e^{-\rho_1/2}\rho_1^{m/2} u_1(\rho_1) \qquad (13.11)$$

حيث يحقق التابع $u_1(\rho_1)$ المعادلة التالية :

$$\rho_1 \frac{d^2 u_1}{d\rho_1^2} + (m + 1 - \rho_1)\frac{du_1}{d\rho_1} + \left(\beta_1 - \frac{m+1}{2}\right) u_1 = 0 \qquad (13.12)$$

وسيكون الحل بشكل كثير حدود كما هو الحال فى المعادلة (12.15) ، أما شكل هذا الحل عند الصفر واللانهاية فيتحدد بالمضروبين الأولين أمام u_1 فى (13.11) . وإذا حقق المعامل فى الحد الأخير من (13.12)

$$\beta_1 - \frac{m+1}{2} = n_1 \qquad (13.13)$$

الشرط التالى :

$$n_1 = 0, 1, 2, 3, \ldots \qquad (m \geqslant 0) \qquad (13.14)$$

وفى هذه الحالة يمثل n_1 كثير حدود لاجير من الدرجة n_1 المعرف بالمساواة (12.36)

$$u_1(\rho_1) = Q_{n_1}^m(\rho_1) \quad (13.15)$$

حيث يسمى n_1 العدد الكوانتى المكافىء . ونحل المعادلة الثانية التى يحققها $u_2(\rho_2)$ بالطريقة نفسها فنجد أن :

$$u_2(\rho_2) = Q_{n_2}^m(\rho_2) \quad (13.16)$$

حيث

$$n_2 = \beta_2 - \frac{m+1}{2} \quad (13.17)$$

وكذلك

$$n_2 = 0, 1, 2, \ldots \quad (m \geqslant 0) \quad (13.18)$$

وبصورة مشابهة نستطيع دراسة الحالة عندما تكون m سالبة ، ولكن من الأسهل استعمال العلاقات التالية التى يحققها تابع لاجير

$$Q_n^m(\rho) = (-1)^m \rho^{-m} Q_{n+m}^{-m}(\rho) \quad (13.19)$$

عندئذ تؤول هذه الحالة إلى السابقة مع فارق واحد هو وجوب تعريف أعداد كوانتية جديدة $\bar{n}_1$ و$\bar{n}_2$ ، بحيث أن تكون صحيحة وموجبة أى أن :

$$\begin{aligned} \bar{n}_1 &= n_1 + m = 0, 1, 2, \ldots, \\ \bar{n}_2 &= n_2 + m = 0, 1, 2, \ldots \quad (m < 0) \end{aligned} \quad (13.20)$$

وهكذا تتعين الحالة المستقرة لذرة الهيدروجين بثلاثة أعداد كوانتية هى : العدد المغناطيسى $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ والعددان المكافئان n_1 و n_2 اللذان يحدد تغيرهما من أجل $m \geqslant 0$ و$m < 0$ بالعلاقات (13.14) ، (13.18) و (13.20) . أما التابع الموجى المقابل لهذه الحالة فيمكن كتابته بالشكل التالى :

$$\psi_{n_1 n_2 m} = C_{n_1 n_2 m} e^{-\frac{\rho_1+\rho_2}{2}} (\rho_1\rho_2)^{m/2} Q_{n_1}^m(\rho_1)\, Q_{n_2}^m(\rho_2)\, e^{im\varphi} \quad (13.21)$$

حيث $C_{n_1 n_2 m}$ معامل المعايرة ، وإذا جمعنا (13.13) مع (13.17) نجد ، باعتبار صحة (13.9) ، أن :

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = n_1 + n_2 + m + 1 = \bar{n}_1 + \bar{n}_2 - m + 1 = n \quad (13.22)$$

وعليه فإن العدد الكوانتى الرئيسى n لا يأخذ إلّا القيم الموجبة الصحيحة $n = 1, 2, 3, \ldots$ طبقا لـ (13.5) فإنه يعيّن سويات الطاقة التى تحسب بالعلاقة (12.41) . ويتضح أيضا من (13.22) أن سوية الطاقة ذاتها منطبقة بـ m وبأحد العددين n_1 أو n_2 بحيث يتغير العدد n من 0 حتى $n-m-1$ عند ثبات قيمة m $(m \geqslant 0)$. وبالطريقة نفسها نحسب بسهولة تغير العدد الكوانتى $\bar{n}_1$ فى المجال من الصفر حتى $n-|m|-1$ عندما $m < 0$ وبالتالى تكون درجة الانطباق :

$$n + 2\sum_{m=1}^{n-1}(n-m) = n^2$$

التى حصلنا عليها فى الاحداثيات الكروية . فإذا اعتبرنا العلاقة (10.16) التى تعطى عنصر الحجم فى الاحداثيات القطعية المكافئة ثم حسبنا التكاملات بالنسبة ξ و η ، كما فعلنا فى الملاحظة المذكورة بعد (12.40) فيمكن البرهان على معايرة وتعامد التوابع $\Psi_{n_1 n_2 m}$ التالية :

$$\int d^3x \psi^*_{n_1' n_2' m'} \psi_{n_1 n_2 m} = \delta_{mm'} \delta_{n_1 n_1'} \delta_{n_2 n_2'} \quad (13.23)$$

وذلك بعد اختيار المعامل $C_{n_1 n_2 m}$. وإذا استفدنا من توابع لاجير

$$I_{ns}(\rho) = \frac{1}{\sqrt{n! s!}} e^{-\rho/2} \rho^{\frac{n-s}{2}} Q_s^{n-s}(\rho) \quad (13.24)$$

فإننا نستطيع كتابة التوابع الموجية المعايرة لذرة الهيدروجين فى الاحداثيات القطعية المكافئة كالتالى :

$$\psi_{n_1 n_2 m} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{e^{im\varphi}}{n^2\sqrt{\pi}} I_{n_1+m,\, n_1}(\rho_1)\, I_{n_2+m,\, n_2}(\rho_2) \quad (13.25)$$

حيث $a_0 = \frac{Z}{B} = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2}$ هو نصف قطر مدار بور الأول . ولنبرهن الآن أن التوابع $\psi_{n_1 n_2 m}$ ، التى ستكون توابعا خاصة للمؤثرين H و L_z مقابلة للقيم الخاصة E_n و m ، تحقق المعادلة :

$$\varepsilon_z \psi_{n_1 n_2 m} = \lambda \psi_{n_1 n_2 m} \qquad (13.26)$$

أى أنها توابع خاصة لمسقط مؤثر التباعد المركزى على z (انظر البند ١٢) حيث يمكن كتابة المؤثر ε_z بالشكل التالى :

$$\varepsilon_z = \frac{\hbar^2}{Z e_0^2 m_0}\left[z\nabla^2 - (1 + r\nabla)\frac{\partial}{\partial z}\right] + \frac{z}{r} \qquad (13.27)$$

وإذا استفدنا من عبارة ∇^2 فى الاحداثيات القطعية المكافئة (10.16) ومن العلاقة :

$$(1 + r\nabla)\frac{\partial}{\partial z} = \frac{2}{\xi + \eta}\left(\xi^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi \frac{\partial}{\partial \xi} - \eta^2 \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - \eta \frac{\partial}{\partial \eta}\right) \qquad (13.28)$$

ثم انتقلنا بعد ذلك إلى المتحولات الجديدة ρ_1 و ρ_2 ، انظر (13.8) ، فإننا نجد أن :

$$\varepsilon_z = \frac{1}{n}\left[\frac{2\rho_1\rho_2}{\rho_1 + \rho_2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial \rho_1^2} - \frac{1}{\rho_1}\frac{\partial}{\partial \rho_1} + \frac{\partial^2}{\partial \rho_2^2} + \frac{1}{\rho_2}\frac{\partial}{\partial \rho_2}\right) - \right.$$
$$\left. - \frac{m^2}{2}\frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_1\rho_2}\right] + \frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_1 + \rho_2} \qquad (13.29)$$

حيث اعتبرنا أن ε_z يؤثر على $\psi_{n_1 n_2 m}$ ولهذا أدخلنا العدد الكوانتى n أما المؤثر $\partial^2/\partial\varphi^2$ - فقد استبدلناه بقيمته الخاصة m^2 . وإذا أثرنا الآن بالمؤثر (13.29) على التابع $\psi_{n_1 n_2 m}$ (13.25) ولاحظنا المعادلة (13.10) التى يحققها كل من التابعين $I_{n_1 + m, n}$ و $I_{n_2 + m, n_2}$ فإننا نجد القيمة الخاصة

$$\lambda = \frac{n_1 - n_2}{n} \qquad (13.30)$$

حيث أن المقدار يأخذ عند ثبات n عددا ($2n - 1$) من القيم المختلفة المتغيرة فى المجال

$$- \frac{n-1}{n} \leqslant \lambda \leqslant \frac{n-1}{n} \qquad (13.31)$$

وتساعد العلاقة (13.30) التى تعطى القيم الخاصة λ لمؤثر التباعد المركزى ε_z على فهم المعنى الفيزيائى للعددين الكوانتيين n_1 و n_2 ، يتجه المتجه ϵ ، فى التقريب شبه التقليدى ، من المحرق باتجاه المحور الكبير ، ولهذا يكون λ موجبا عندما $n_1 > n_2$ ، أى أن القسم الأعظم من المسار موجود فى المجال $z > 0$ أما عندما $n_1 < n_2$ فنجد أن $\lambda < 0$ ويكون القسم الأعظم من المسار موجودا فى المجال $Z < 0$.

ب) **ظاهرة شتارك** . لم تستطع الفيزياء الكلاسيكية تفسير ظاهرة انقسام الخطوط الطيفية للذرة الموضوعة فى حقل كهربائى (ظاهرة شتارك) أما الميكانيكا الكوانتية فقد بنت نظرية متناسقة لهذه الظاهرة ، فطبقا للتصورات الكلاسيكية يمكن تقسيم حركة الكترون الذرة إلى ثلاثة اهتزازات متعامدة . ولنوجه الحقل الكهربائى الثابت باتجاه z فيكون $\mathscr{E}\,(\mathscr{E}_x = \mathscr{E}_y = 0, \mathscr{E}_z = \mathscr{E})$ وعندئذ نكتب طاقة التأثير المتبادل بين الالكترون والحقل كما يلى :

$$V' = -er\mathscr{E} = e_0 z\mathscr{E} \quad (e = -e_0) \qquad (13.32)$$

أما الاهتزاز على المحور z فيوصف بالمعادلة التالية :

$$m_0\ddot{z} + m_0\omega_0^2 z = -e_0\mathscr{E} \qquad (13.33)$$

حيث m_0 - كتلة الالكترون و ω_0 - التوتر الدورانى لاهتزازه . ومن السهل أن نرى أن حل المعادلة (13.33) يكتب بالشكل التالى :

$$z = -\frac{e_0\mathscr{E}}{m_0\omega_0^2} + A\cos(\omega_0 t + \varphi) \qquad (13.34)$$

وهكذا نرى أن تأثير القوة الثابتة $(-e_0\mathscr{E})$ فى الفيزياء الكلايسيكية يؤدى إلى تغيير موضع توازن الجملة ، ولكن ذلك لا يؤثر بأى شكل من الأشكال على تواتر الاهتزاز ، وبالتالى نرى طبقا للتصورات الكلاسيكية أن تواتر الاشعاع الذى يتحدد بالتواتر الميكانيكى لاهتزاز الكترونات الذرات (خلافا

للتجربة) غير تابع بالضرورة لوجود الذرة فى حقل كهربائى . ولندرس الآن ظاهرة شتارك من وجهة نظر الميكانيكا الكوانتية ، حيث يتم التمييز بين ظاهرتى شتارك الخطية واللاخطية . إذ تلاحظ الأولى فى الذرات الشبيهة بالهيدروجين فقط ، وهذا ناتج عن أن لمثل هذه الذرات انطباقا بالعددين الكوانتيين المغناطيسى m والمدارى l ، انظر البند ١٢ ، ولهذا تتكون حالة ذات طاقة معينة من تراكب مجموعة حالات مختلفة بالعدد الكوانتى l ، وبالتالى فليس لهذه الحالة زوجية معينة (انظر البند ١٠) ، وتختلف القيمة الوسطى لمؤثر الاضطراب (13.32) المتناسب مع عزم ثنائى الأقطاب الكهربائى عن الصفر ، وهذا ما يسبب ظاهرة شتارك الخطية . أما ما يخص الذرات الأخرى حيث لا يتواجد انطباق بـ l ، وينعدم ثنائى الأقطاب لها فلا تلاحظ ظاهرة شتارك عندها . لندرس بالتفصيل نظرية ظاهرة شتارك لذرة الهيدروجين ، ان الحقل الكهربائى الخارجى $\mathscr{E}$ (الذى يبلغ فى التجارب القيمة 10^5 V/cm – 10^4) أصغر بكثير من الحقل الداخلى الذى ينتج عن النواة

$$\mathscr{E}_{\text{nucl}} = \frac{e_0}{a_0^2} \approx 5 \cdot 10^9 \text{ V/cm}$$

(حيث a_0 - نصف قطر مدار بور الأول) ولهذا يمكن لحل هذه المسألة أن نستفيد من نظرية الاضطراب المنسوبة إلى الحالة المنطبقة حيث تحسب طاقة الالكترون الكامنة (13.32) كطاقة اضطراب ، بينما يعين اتجاه الحقل الكهربائى اتجاها محددا فى الفراغ (المحور z) ولهذا من الأسهل لنا لحساب ظاهرة شتارك استعمال التوابع القطعية المكافئة $\psi_{n_1 n_2 m}$ (13.25) كتوابع قاعدية فى التقريب الصفرى ، حيث تقابل كل سوية طاقة n عددا n^2 من الحالات $\psi_{n_1 n_2 m}$ ذات أعداد كوانتية n_1, n_2, m تحقق الشرط :

$$n_1 + n_2 + m + 1 = n \qquad (13.35)$$

أما تواتر الاضطراب (13.32) فى الاحداثيات القطعية المكافئة :

$$V' = \frac{1}{2} e_0 \mathscr{E} (\xi - \eta) \qquad (13.36)$$

وأما العناصر المصفوفية التى تقابل n فهى التالية :

$$\langle n_1' n_2' m' \mid V' \mid n_1 n_2 m \rangle =$$

$$= \frac{1}{8} e_0 \mathscr{E} \int_0^\infty d\xi \int_0^\infty d\eta \int_0^{2\pi} d\varphi \psi^*_{n_1' n_2' m'} (\xi^2 - \eta^2) \psi_{n_1 n_2 m} =$$

$$= \frac{1}{4} e_0 a_0 \mathscr{E} (v_{n_1 m} - v_{n_2 m}) \delta_{mm'} \delta_{n_1 n_1'} \delta_{n_2 n_2'} \qquad (13.37)$$

ولبرهان هذه العلاقة نلاحظ أن المصفوفة يجب أن تكون قطرية بـ m بسبب استقلال V' عن الزاوية φ. أما فيما يخص n_1 و n_2 واعتبار المصفوفة قطرية بالنسبة لهما ، فهذا ينتج من الشرط (13.35) خاصة ومن تعامد توابع ليجاندر $I_{l+s,\, s}$ التالية :

$$\int_0^\infty d\rho\, I_{l+s',s'} (\rho)\, I_{l+s,s} (\rho) = \delta_{ss'} \qquad (13.38)$$

وعليه نحسب التكاملات $v_{n_1 m}$ و $v_{n,m}$ التالية :

$$v_{n_i m} = \int_0^\infty \rho^2 I^2_{n_i+m,n_i} (\rho)\, d\rho =$$

$$= \frac{1}{n_i! (n_i + m)!} \int_0^\infty \rho^{2+m} e^{-\rho} [Q^m_{n_i} (\rho)]^2 d\rho \qquad (i = 1, 2) \qquad (13.39)$$

وباستخدام نفس الطريقة المطبقة فى البند ١٢ لمعايرة التوابع القطرية لذرة الهيدروجين حيث وضعنا أحد كثيرى الحدود بشكل متسلسلة أما الثانى فتركناه بشكله المغلق (12.36) ، وعندئذ إذا استكملنا بالتجزئة فى (13.39) عددا مناسبا من المرات فإننا نجد أن :

$$v_{n_i m} = (2n_i + m + 1)(2n_i + m + 2) + 2 (n_i + m) n_i \quad (i = 1, 2) \qquad (13.40)$$

أما الفرق بين التكاملين أى $v_{n_1 m} - v_{n_2 m}$ ، وباعتبار صحة (13.35) ، فيساوى

$$v_{n_1 m} - v_{n_2 m} = 6n(n_1 - n_2) \qquad (13.41)$$

أى أن الاضطراب (13.37) قطرى ولهذا فهو لا يمزج السويات المنطبقة ولكنه يقسمها فقط ، أما مقدار هذا الانقسام فيتعين بمتوسط المقدار V' أى

$$E' = \langle V' \rangle \qquad (13.42)$$

وإذا عوضنا (13.41) فى (13.37) فإننا نجد

$$E'_{n\lambda} = \frac{3}{2} e_0 a_0 \mathscr{E} n (n_1 - n_2) = \frac{3}{2} e_0 \mathscr{E} a_0 n^2 \lambda \qquad (13.43)$$

حيث $\lambda = \frac{(n_1 - n_2)}{n}$ هى القيمة الخاصة لمسقط شعاع التباعد المركزى على z أى ε_z ، ونلاحظ من المساواة السابقة أن مقدار التباعد يتعلق بالفرق $(n_1 - n_2)$ أو (بـ λ) ، هذا الفرق الذى يمكن أن يأخذ ($2n-1$) قيمة ، وهى تلك التى تنحصر بين ($n - 1$) - و ($n - 1$) + ولهذا يقسم الحقل الكهربائى سويات الطاقة n إلى $2n - 1$ سوية جزئية ، مما ينزع انطباق n^2 سوية ولكن بصورة غير تامة . ولندرس على سبيل المثال السوية الأولى المهيجة $n = 2$* المنطبقة أربع مرات ، ولهذا فإن طاقتها عند غياب الاضطراب ، تساوى

$$E_2^0 = -R\hbar/4 \qquad (13.44)$$

أما الحالة $\psi_{n_1 n_2 m}$ فتعطى بالعلاقة (13.25) ، وتنقسم السوية السابقة إلى ثلاث سويات جزئية موافقة لثلاث قيم λ هى $\lambda = \pm 1/2, 0$ ، أى

$$E'_{2\lambda} = \pm 3 e_0 a_0 \mathscr{E},\ 0 \qquad (13.45)$$

أما التوابع الخاصة والطاقات المقابلة عندما $m = 0$ فهى

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{2}} (R_{20} Y_0^0 - R_{21} Y_1^0), \quad \lambda = \frac{1}{2}$$

$$E_{2,1/2} = -\frac{R\hbar}{4} + 3 e_0 a_0 \mathscr{E} \qquad (13.46)$$

---

* أن السوية الأساسية $n = 1$ غير منطبقة وبالتالى لن تنقسم .

$$\psi_{010} = \frac{1}{\sqrt{2}} (R_{20}Y_0^0 + R_{21}Y_1^0), \quad \lambda = -\frac{1}{2}$$
$$E_{2,-1/2} = -\frac{Rh}{4} - 3e_0a_0\mathscr{E}$$

وبالتالى يزول الانطباق . أما ما يخص الحالة عندما $m = \pm 1$ فإننا نجد

$$\psi_{00\pm1} = R_{21}Y_1^{\pm1}, \quad \lambda = 0$$
$$E_{20} = -\frac{Rh}{4} \qquad (13.47)$$

وبالتالى يبقى الانطباق موجودا حتى بوجود الحقل الكهربائى ، ونلاحظ أنه لو كنا اخترنا كتوابع قاعدية التوابع ψ_{nlm} التى تعتبر حلا لمعادلة شرودينجر غير المضطربة ، وهى التوابع الخاصة للمؤثرين L^2 و L_z

لما كنا قد وجدنا أن الاضطراب قطرى ، وكنا سنجد ، طبقا للنظرية الموضحة فى البند ٨ ، أن هذا سيؤدى إلى انزياح الحالات غير المضطربة وبالنتيجة سنحصل على تركيب صحيح من التوابع ψ_{nlm} الموافقة للتقريب الصفرى وما يقابلها من السويات الطاقوية فى التقريب الأول لنظرية الاضطراب وهذا يتطابق مع ما رأيناه من نتائج حسب (13.46) -(13.47) .
ويمكن تعليل ظاهرة شتارك من الناحية الكوانتية كما يلى : بما أنه ليس للسويات المهيجة تناظر مركزى وليس لها زوجية محدودة فلابد أن يظهر للذرة متوسط عزم ثنائى أقطاب كهربائى $\langle p \rangle$ يختلف عن الصفر ، وبما أن طاقة الاضطراب (13.32) تكتب أيضا بالشكل $V' = -(pE)$ فيمكن بمقارنة هذه العلاقة مع (13.43) للحصول على مركبة عزم ثنائى الأقطاب الكهربائى وعلى z فى الحالة (n, λ, m) وهى التالية :

$$\langle p_z \rangle = -{}^3/_2 e_0 a_0 n^2 \lambda \qquad (13.48)$$

حيث يقع الالكترون فى المثال المعطى سابقا $n = 2, \lambda = \pm{}^1/_2, m = 0$ ، بصورة رئيسية . أما فى المجال $z > 0$ (عندما $\lambda = +{}^1/_2$) أو فى المجال $z < 0$ (عندما $\lambda = -{}^1/_2$) ، ولهذا يتوجه عزم ثنائى الأقطاب فى هذه

الحالات بعكس اتجاه الحقل ($\lambda = +1/2, \langle p_z \rangle = -3e_0a_0$) أو باتجاه الحقل ($\lambda = -1/2, \langle p_z \rangle = 3e_0a_0$) . أما عندما $\lambda = 0$ و $m = \pm 1$ (مع قيمة محدودة لـ l هي الواحد) فينعدم عزم ثنائي الأقطاب $\langle p_z \rangle = 0$ ولهذا لا تظهر أي طاقة اضافية E' .

وهكذا نرى أن سبب ظاهرة شتارك الخطية من أجل ذرة الهيدروجين هو وجود عزم ثنائي أقطاب كهربائي في حالاته المهيجة ، وقد تطابقت النتائج النظرية التي تم الحصول عليها على أساس التقريب الخطي بشكل جيد مع المعطيات التجريبية في الحقول الضعيفة فقط ($\mathscr{E} \sim 10^4\ V/cm$) أما عندما يبلغ الحقل القيمة ($\mathscr{E} \sim 10^5\ V/cm$) فيظهر انقسام اضافي (ظاهرة شتارك رباعية الأقطاب) وهي الناتجة من زوال الانطباق بالعدد الكوانتي المغناطيسي m . ولا يلاحظ مفعول شتارك في الحقول التي تزيد على $10^5\ V/cm$ وهذا ناتج عن تأين الذرات الذاتي ، أي لاقتلاع الالكترونات الواقعة على السويات المهيجة .

البند ١٤ ـ تبدد (تشتت) الجسيمات المرن تحت تأثير مركز قوى

لندرس أولا التبدد تحت تأثير مركز قوى عندما تتضائل طاقة الكمون في اللانهاية أكثر مما يتناقص المقدار r^{-1} ، حيث يمكن أن يقرب التابع الموجي في اللانهاية إلى موجة مستوية ، أما ما يخص الحالة الحدية للكمون الكولوني $V \sim r^{-1}$ (أي قوة التأثير البعيد) فيمكن أن تدمج في التقريب المذكور، لأن تشوه الموجة المستوية في اللانهاية الناتج عن الحقل الكولوني ، كما سنبرهن فيما بعد ، يقتصر على انزياح لوغاريتمي طفيف للطور من أجل حساب المقطع التفاضلي الفعال عند الزوايا الكبيرة للتبدد .

أ) **تقريب بورن.** لنفرض أن الجسيم كان حرا عندما $t \leq 0$ ، أى أنه يتحرك حركة مستقيمة منتظمة باندفاع $p = \hbar k$ وبطاقة

$$E = \frac{p^2}{2m_0} = c\hbar K, \quad \left(K = \frac{k^2}{2k_0}, \ k_0 = \frac{m_0 c}{\hbar}\right)$$

ولنفرض أنه اعتبارا من اللحظة $t = 0$ يبدأ الكمون بالتأثر باضطراب معبر عنه بالطاقة الكامنة $V(r)$ ، وعندئذ يوجد احتمال معين لانتقال الجسيم إلى حالة أخرى باندفاع $p' = \hbar k'$ وطاقة $\left(K' = \frac{k'^2}{2k_0}\right)$ $E' = c\hbar K'$ أى أنه يجب أن يتبدد الجسيم نتيجة لتأثير الاضطراب . أما التوابع الموجية للحالتين البدائية والنهائية التى تصف الحركة الطليقة (التقريب الأول) فتساوى

$$\psi_k(t) = L^{-3/2} e^{-icKt + ikr}$$
$$\psi_{k'}(t) = L^{-3/2} e^{-icK't + ik'r} \qquad (14.1)$$

حيث L^3 حجم مكعب الدورية الأساسى أما مركبات الاندفاع k_i و k'_i $(i = 1,2,3)$ فترتبط مع الأعداد الصحيحة n_i و n'_i بالعلاقات التالية :

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L}, \quad k'_i = \frac{2\pi n'_i}{L}$$

ويحقق التابع الموجى (14.1) معادلة شرودينجر غير المضطربة التالية :

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\psi = 0 \qquad (14.2)$$

كما يعتبر حلا خاصا من الحل العام :

$$\psi = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{k'} C' e^{-icK't + ik'r} \qquad (14.3)$$

حيث يكون المعامل C' تابعا للاندفاع k' . أما عند اعتبار طاقة الاضطراب

$V' = V(r)$ فسنبحث عن الحل انطلاقا من نظرية الاضطراب غير الراسخة ، حيث يفرض أن المعاملات الاحتمالية هى توابع للزمن ، وبما أنه فى اللحظة $t = 0$ كان الجسيم فى الحالة k فيجب أن نفرض أن :

$$C'(t=0) = \delta_{k'k}. \qquad (14.4)$$

وعندئذ نحصل لحساب $C'(t)$ $(k' \neq k)$ ، انظر (8.56) ، على العلاقة التالية :

$$C' = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt e^{ict(K'-K)} V_{k'k} \qquad (14.5)$$

حيث

$$V_{k'k} = \int \psi^*_{k'} V(r) \psi_k d^3x$$

وإذا عوضنا التوابع الموجية بقيمتها من (14.1) ، نجد بعد التكامل بالنسبة للزمن أن :

$$C'(t) = \frac{1}{L^3} V_\varkappa \frac{1 - e^{ict(K'-K)}}{c\hbar(K'-K)}$$

حيث :

$$V_\varkappa = \int e^{i\varkappa r} V(r) d^3x, \quad \varkappa = k - k' \qquad (14.6)$$

ومن هنا نجد احتمال الانتقال ، أى أن :

$$w = \frac{\partial}{\partial t}\sum_{k'} |C'|^2 = \frac{1}{L^6}\sum_{k'} |V_\varkappa|^2 \frac{2\sin ct(K'-K)}{c\hbar^2(K'-K)} \qquad (14.7)$$

وإذا استفدنا الآن من المساواة :

$$\lim_{kt\to\infty} \frac{\sin ct\,(K'-K)}{\pi\,(K'-K)} = \delta\,(K'-K) \qquad (14.8)$$

نرى أن (14.7) تصبح كما يلى :

$$w = \frac{2\pi}{L^6 c\hbar^2} \sum_{k'} |\,V_{\varkappa}|^2\, \delta\,(K'-K) \qquad (14.9)$$

ان وجود التابع - δ تحت علامة الجمع Σ يؤدى إلى مصونية طاقة الجسيم أى أن $K' = K$ ولذلك يسمى مثل هذا التبدد بالمرن* ، وعند الانتقال من الجمع إلى التكامل فى (14.9) يجب استخدام العلاقة :

$$\sum_{k'} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \int k'^2\, dk'\, d\Omega = \int k_0 k'\, dK'\, d\Omega \qquad (14.10)$$

وكثيرا ما يميّز التبدد بمقطعه الفعال الذى يساوى نسبة احتمال الانتقال ω إلى عدد الجسيمات N الواردة فى وحدة الزمن على وحدة السطح ($S = 1\text{cm}^2$) المتعامد مع حزمة الجسيمات (أو مع تيار الجسيمات) ، ومن الواضح أن الجسيمات التى تسقط على السطح المذكور فى وحدة الزمن هى تلك التى تقع على مسافة لا تزيد عن سرعة الجسيم v ، أى أنها تتواجد ضمن الحجم $v S = v$ وبالتالى يمكن حساب العدد N كجداء لكثافة الجسيمات $\rho_b = L^3$ فى الحجم الذى يساوى عدديا سرعة الجسيم ، أى أن :

$$N = \frac{v}{L^3} = \frac{c}{L^3}\,\frac{k}{k_0} \qquad (14.11)$$

ومن العلاقات (14.9) - (14.11) نجد لحساب مقطع التبدد الفعال العبارة التالية :

$$\sigma = \frac{w}{N} = \oint \sigma\,(\vartheta,\ \varphi)\, d\Omega \qquad (14.12)$$

• يمكن أن ينكر الاشعاع المتباطىء ، كمثال على التبدد غير المرن ، حيث يطلق الالكترون فوتونا وبالتالى يصبح $K' < K$.

حيث تسمى العبارة ما تحت التكامل بالمقطع التفاضلى الفعال وهى تعبر عن عدد الجسيمات المتبددة الساقطة ضمن زاوية مجسمة $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta s\varphi d\Omega$ (ϑ و φ هما الزاويتان الكرويتان للتبدد أى زاويتا المتجه k) كما يحسب المقطع الفعال بالعلاقة :

$$\sigma(\vartheta, \varphi) = \left(\frac{m_0}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |V_\varkappa|^2 \qquad (14.13)$$

وفى الحالة الخاصة عندما يكون لمركز التبدد تناظر كروى نجد أن :

$$V_\varkappa = \int_0^\infty V(r) r^2 dr \oint e^{i\varkappa r} d\Omega'$$

حيث $d\Omega'$ الزاوية المجسمة فى الفراغ r أما $d\Omega$ فى (14.12) فهى الزاوية المجسمة فى فراغ المتجه k' . وإذا استكملنا العلاقة الأخيرة بالنسبة للزاوية المجسمة نجد أن :

$$V_\varkappa = \frac{4\pi}{\varkappa} \int_0^\infty r \sin \varkappa r \cdot V(r)\, dr$$

ومن هنا نستخلص أن المقطع الفعال للتبدد المرن يساوى :

$$\sigma(\vartheta) = |f(\vartheta)|^2 \qquad (14.14)$$

حيث

$$\varkappa = |\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'| = 2k \sin\frac{\vartheta}{2} \qquad (14.14a)$$

أما المقدار

$$f(\vartheta) = -\frac{2m_0}{\hbar^2\varkappa} \int_0^\infty r \sin \varkappa r \cdot V(r)\, dr \qquad (14.15)$$

فيسمى بسعة التبدد . كما وتصف العلاقة (14.14) التبدد المرن للجسيمات ضمن التقريب الأول لنظرية الاضطراب وهو ما يسمى بتقريب بورن .

(التقريب البورنى) . ونلاحظ أيضا أنه يمكن حل هذه المسألة طبقا لنظرية الاضطراب الراسخة لأن الطاقة الكامنة لا تتعلق بالزمن ، ولكننا بالرغم من ذلك ، فقد فضلنا استخدام نظرية الاضطراب غير الراسخة لحساب المقطع الفعال لأنها النظرية الأكثر تعميما من الناحية الرياضية ، فهى مثلا تساعد فى حل كثير من مسائل التحريك الكهربائى الكوانتى وذلك بأن نأخذ بعين الاعتبار التأثير المتبادل للالكترونات مع الحقل الكهرطيسى المكمم ثانية .

وتطبق العبارة التى حصلنا عليها لحساب $\sigma(\vartheta)$ بطريقة نظرية الاضطراب ضمن حدود معينة ، فعندما تكون القوى قصيرة التأثير (قوى نووية ، ذرة معتدلة ، كرة غير نفاذة . . . إلخ . .) ، بحيث يمكن اهمالها على ابعاد تفوق نصف قطر فعال معين a ، فلا يمكن للمقطع الفعال أن يتجاوز المقطع الهندسى لمجال تأثير هذه القوى (حتى أنه يمكن لهذه القوى أن تكوّن حاجزا لا تستطيع الجسيمات أن تنفذ منه) وهكذا نستنتج شروط تطبيق نظرية الاضطراب على القوى قصيرة التأثير

$$\sigma < \sigma' \qquad (14.16)$$

حيث

$$\sigma' \sim \pi a^2$$

ب) **التبدد فى كمون يوكاوا** . من المعلوم أن طاقة التأثير التى فرضها يوكاوا هى التالية :

$$V = -A\frac{e^{-k_0 r}}{r} \qquad (14.17)$$

حيث A - ثابت ما أما المقدار $a = \frac{1}{k_0}$ فهو نصف قطر التأثير الفعال للقوة ولهذا النوع من الكمون تطبيقات كثيرة . فأبسط شكل من أشكال تأثير القوى النووية يحقق القانون السابق ، وفى هذه الحالة يكون $A = g^2$ ، حيث g هى الشحنة النووية التى تفوق الكهربائية بأكثر من عشر مرات أما نصف قطر تأثير القوى النووى فيساوى طول موجة كومبتون للحقل الميزونى - p ، أى أن :

$$a = \frac{\hbar}{m_\pi c} \sim 10^{-13} \text{ cm} \qquad (14.18)$$

ومن الممكن تقريب الطاقة الكامنة الناتجة عن نموذج* توماس ـ فيرمى إلى النموذج (14.17) عند تبدد الالكترونات السريعة (أو الجسيمات الفا) على ذرة معتدلة. وفى هذه الحالة تكون $A = Ze_0^2$ (حيث Z الرقم الدورى للذرة) أما نصف القطر الفعال للذرة فى نموذج توماس ـ فيرمى ، انظر (25.66) ، فيساوى :

$$a = \frac{\gamma a_0}{Z^{1/3}} \qquad (14.19)$$

حيث γ ـ معامل من مرتبة الواحد . وأخيرا نلاحظ أنه إذا كتبنا $a \to \infty$ فإننا سنحصل على كمون الحقل الكولونى للذرة ، وهو ما يمكن اعتباره حالة خاصة من العلاقة (14.17) ، ولنبدل الآن (14.17) فى (14.14) فنجد بالاعتماد على صحة العلاقة :

$$\int_0^\infty r \sin \varkappa r \cdot V(r)\, dr = -A \int_0^\infty \sin \varkappa r \cdot e^{-k_0 r}\, dr = -A \frac{\varkappa}{\varkappa^2 + k_0^2}$$

لحساب المقطع التفاضلى الفعال للتبدد المرن الدستور التالى

$$\sigma(\vartheta) = \frac{4m_0^2 A^2 a^4}{\hbar^4 (\varkappa^2 a^2 + 1)^2} \qquad (14.20)$$

وطبقا لـ (14.14a) يكون :

$$\varkappa^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = 4 \frac{p^2}{\hbar^2} \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \qquad (14.21)$$

---

* لا تختلف كثيرا نتائج التقريب بالنماذج الأخرى عن (14.17) بسبب صغر زمن التأثير ولكن تبدو الحسابات بالعلاقة (14.17) أسهل منها فى النماذج الأخرى .

حيث p هو اندفاع الجسيم . وعند استعمال العلاقة (14.20) يجب تمييز الحالتين التاليتين :

١ ـ حالة تبدد الجسيمات البطيئة نسبيا عندما يتحقق $xa << 1$ مهما كانت زاوية التبدد ، وعندئذ لن يتعلق $\sigma(\vartheta)$ بـ ϑ ولذلك فإن :

$$\sigma(\vartheta) = \frac{4m_0^2 A^2 a^4}{\hbar^4} \qquad (14.22)$$

ويعتبر استقلال مقطع التبدد عن الزاوية ϑ (تساوى المناحى) مميزاً لتبدد الجسيمات ذات الطاقة المنخفضة نسبيا على مركز قوى التأثير .

٢ ـ حالة تبدد الجسيمات السريعة نسبيا بزوايا تحقق العلاقة $xa >> 1$ وعندئذ لن يتعلق المقطع التفاضلى الفعال بنصف قطر التأثير به لذلك فإن :

$$\sigma(\vartheta) = \frac{4m_0^2 A^2}{\hbar^4 x^4} \qquad (14.23)$$

ومنه نجد أن التبدد فى حقل كمون يوكاوا سيكون شبيها بالتبدد فى حقل كولونى ، ولهذا لا يكون لالكترونات الذرة دور كبير ، فعند تبدد الالكترونات السريعة أو الجسيمات بزوايا كبيرة نسبيا على ذرات معتدلة يكفى عندئذ معرفة كمون النواة لدراسة خصائص هذا التبدد ، فإذا فرضنا فى (14.20) أن $A = Ze_0^2$ و $x = \frac{2p}{\hbar}\sin\frac{\vartheta}{2}$ فإننا نجد علاقة رذرفورد التالية :

$$\sigma(\vartheta) = \frac{Z^2 e_0^4 m_0^2}{4p^4 \sin^4\frac{\vartheta}{2}} \qquad (14.24)$$

ويتضح من هذه العلاقة أن قطر مقطع التبدد يتعلق بشكل رئيسى بزاوية التبدد عندما يكون للقوى المؤثرة نصف قطر تأثير كبير ، إلا أنه عندما يكون $k = \frac{p}{\hbar}$ كبيرا ، فيمكن أن تتواجد زوايا صغيرة ϑ بحيث تتحقق العلاقة

$$\frac{2pa}{\hbar}\sin\frac{\vartheta}{2} \ll 1 \qquad (14.25)$$

وفى الحالة الخاصة عندما $\vartheta \to 0$ يتباعد $\sigma(\vartheta)$ المحسوب بعلاقة رذرفورد وعندئذ يجب أن تظهر سمات القوى قصيرة التأثير بسبب زوال الغمامة الالكترونية الحاجبة لهذه القوى . وفى هذه الحالة تحدد الشروط (14.25) مجال تطبيق علاقة رذرفورد.من (14.19) و (14.20) نجد عندما $\vartheta = 0$، أى عند التبدد إلى الأمام،للمقطع الفعال العبارة التالية :

$$\sigma_{\vartheta\to 0}(\vartheta) = 4\gamma^4 a_0^2 Z^{2/3} \sim a_0^2 Z^{2/3} \qquad (14.26)$$

أما المقطع العرضى الكلى فيحسب طبقا لـ (14.21) بعد التكامل بـ ϑ أى أن :

$$\sigma = \frac{16\pi m_0^2 A^2 a^4}{\hbar^4}\,\frac{1}{4k^2a^2+1} \qquad (14.27)$$

ومنه نستنتج حدود تطبيق طريقة نظرية الاضطراب من أعلى ومن أسفل* ، أى أن :

$$\gamma_1 = \frac{m_0 a A}{\hbar^2} \ll 1 \quad , \quad ka \ll 1 \qquad (14.28)$$

$$\gamma_2 = \frac{m_0 A}{\hbar^2 k} \ll 1 \quad , \quad ka \gg 1\ ^{*)} \qquad (14.29)$$

أى أن وسيط النشر هو γ_1 عندما $ka \ll 1$ و γ_2 عندما $ka \gg 1$ ولا يمكن تطبيق التقريب البورنى إلا ضمن هذه الشروط ولا بد من استخدام طرائق أكثر دقة لحل المسائل فى الحالات الأخرى .

---

* يمكن أن يطبق الحد الأقصى (14.29) $ka \gg 1$ على الكمونات الكولونية ($a \to \infty$) فإذا فرضنا أن $A = Ze_0^2$ و $m_0 v = m_0 c\beta = \hbar k$ نجد أنه يمكن تطبيق التقريب البورنى على سرع ليست كبيرة جدا تحقق العلاقة

$$\gamma_2 = \frac{Z\alpha}{\beta} \ll 1$$

حيث $\alpha = \frac{e_0^2}{c\hbar} = \frac{1}{137}$ هو ثابت البنية الرقيقة .

جـ) المقطع الجزئى الفعال . لحساب مقطع التبدد من القيم الصغيرة والكبيرة لـ γ_1 و γ_2، انظر (14.27) ، (14.28) ، (14.29) ، لا بد من البحث عن الحل بشكل مجموع مقاطع فعلية جزئية يتعلق كل منها بالعدد الكوانتى l وعندئذ يجب قبل كل شىء نشر الموجة الواردة التالية :

$$\psi_{inc} = e^{ikz} = e^{ikr\cos\vartheta} \qquad (14.30)$$

التى تصف الجسيمات المنتشرة باتجاه z بسرعة $v = \frac{\hbar k}{m_0}$ أى يجب نشر هذه الموجة بأمواج كروية تكتب طبقا لـ (11.52) بالشكل التالى :

$$e^{ikz}_{kr \gg 1} \approx \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}{kr} P_l(\cos\vartheta) \qquad (14.31)$$

ان الصيغة التقاربية للتابع الموجى لجسيم يتحرك فى حقل كمون $V(r)$ ، انظر (11.45) و (11.58) ، هى التالية :

$$\psi_{ass} \approx \sum_{l=0}^{\infty} C_l P_l(\cos\vartheta) \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)}{kr} \qquad (14.32)$$

مع العلم أن الطور δ_1 يتعين بالتقريب الأول بالعلاقة (11.60) ولكنه يمكن أن يحسب بدقة أكثر فى بعض الحالات ، فمن الواضح أن الموجة المتبددة تتعين بالعلاقة التالية :

$$\psi_{sca} = \psi_{ass} - \psi_{inc} = \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2ik} P_l(\cos\vartheta) \times$$
$$\times \left\{ e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} \left[C_l e^{i\delta_l} - i^l (2l+1)\right] - e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} \left[C_l e^{-i\delta_l} - i^l (2l+1)\right] \right\}$$

أما المعامل المجهول C_l فيحسب من الشرط التالى : يجب على التابع ψ_{sca} أن يمثل موجة كروية متباعدة ولهذا يجب أن ينعدم المعامل أمام الدرجة الكروية المتقاربة $e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}$ وعندئذ يكون لدينا :

$$C_l = i^l (2l+1) e^{i\delta_l}$$

ونجد لحساب الموجة المتبددة العبارة التالية :

$$\psi_{sca} = \frac{f(\vartheta)}{r} e^{ikr}$$

حيث يمثل التابع ($f(\vartheta)$) سعة التبدد ، انظر (14.15) ، وتعطى قيمته بشكل دقيق بالعلاقة الآتية :

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\left(e^{2i\delta_l} - 1\right) P_l(\cos\vartheta) \qquad (14.33)$$

ومن المعلوم أن النسبة بين المقطع التفاضلى الذى يصف التبدد بزاوية ϑ باحتمال مرور الجسيم فى وحدة الزمن خلال عنصر السطح الكروى $dS = r^2 d\Omega$ أى أن :

$$dW_{sca} = v\psi^*_{sca}\psi_{sca} r^2 \, d\Omega = v |f(\vartheta)|^2 d\Omega$$

وتيار الجسيمات الواردة ، أى إلى عدد الجسيمات الساقطة عموديا على وحدة السطوح فى وحدة الزمن تساوى إلى

$$W_{inc} = v\psi_{inc}\psi_{inc} = v$$

ومن نجد المقطع التفاضلى الفعال :

$$d\sigma = \frac{dW_{sca}}{W_{inc}} = |f(\vartheta)|^2 2\pi \sin\vartheta \, d\vartheta \qquad (14.34)$$

حيث فرضنا أن للحقل تناظرا محوريا ، ولهذا كتبنا الزاوية المجسمة $d\Omega$ بالشكل التالى :

$$d\Omega = 2\pi \sin\vartheta \, d\vartheta$$

وإذا عوضنا $f(0)$ بقيمتها من (14.33) فى (14.34) واعتبرنا شرط تعامد كثير حدود ليجاندر التالى :

$$\int_0^{\pi} P_l(\cos\vartheta) P_{l'}(\cos\vartheta) \sin\vartheta \, d\vartheta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

نجد عبارة المقطع الكلى الفعال التالية :

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \qquad (14.35)$$

حيث يعطى المقطع الجزئى σ_l بالعلاقة الآتية :

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l \qquad (14.35a)$$

وعندئذ يقال التبدد - s عندما $l = 0$ والتبدد - p عندما $l = 1$ وهكذا . . .
ويمكن بمقارنة (14.35) و (14.33) وملاحظة أن $P_l(1) = 1$ ، برهان ما يسمى بالنظرية الضوئية

$$\sigma = \frac{2\pi}{ik}[f(0) - f^*(0)] = \frac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im}\, f(0)$$

التى تعطى العلاقة بين المقطع الكلى σ وقسم السعة $f(0)$ الوهمى (Im) المقابل للتبدد باتجاه الامام أى عندما $\vartheta = 0$. ولنلاحظ أن العلاقة الدقيقة ، التى تعطى سعة التبدد ، انظر (14.33) ، تتحول إلى العلاقة التقريبية المحسوبة بالتقريب البورنى ، انظر (14.15) ، عندما يتحقق الشرطان التاليان :

١) $\delta_l \ll 1$ ولهذا نكتب سعة التبدد بالشكل الآتى :

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,\delta_l P_l(\cos\vartheta) \qquad (14.35b)$$

٢) امكانية تطبيق التقريب (11.60) فيما يخص δ_l أى أن :

$$\delta_l = -\frac{\pi m_0}{\hbar^2}\int_0^{\infty} V(r)\, r J_{l+1/2}^2(kr)\, dr \qquad (14.36)$$

وبالفعل إذا عوضنا (14.36) فى المساواة (14.35b) نجد أن :

$$f(\vartheta) = -\frac{\pi m_0}{\hbar^2}\int_0^{\infty} r V(r)\, dr \sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{k}(2l+1)\, P_l(\cos\vartheta)\, J_{l+1/2}^2 \qquad (14.37)$$

ثم إذا لاحظنا العلاقة :

$$\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,P_l(\cos\vartheta)\,J^2_{l+1/2}(kr)=\frac{2}{\pi}\,\frac{\sin\varkappa r}{\varkappa} \qquad (14.38)$$

حيث

$$\varkappa=2k\sin\frac{\vartheta}{2}$$

فيمكن تحويل سعة التبدد (14.35b) إلى الشكل المحسوب بالتقريب البورنى أى أن :

$$f(\vartheta)=-\frac{2m_0}{\varkappa\hbar^2}\int_0^{\infty} r\sin\varkappa r\cdot V(r)\,dr \qquad (14.39)$$

د) التبدد على حاجز كمونى . لندرس تبدد الجسيمات على حاجز كمونى تربيعى متناظر كرويا عندما تتغير الطاقة الكامنة طبقا للقانون :

$$V=\begin{cases} V_0 & , \quad r<a \\ 0 & , \quad r>a \end{cases} \qquad (14.40)$$

ولهذا المثال أهمية خاصة لأنه يقبل حلا دقيقا خارج اطار التقريب البورنى . ولقد وجدت نظرية التبدد على حاجز كمونى تطبيقا جيدا فى الفيزياء النووية ، وتبين أن نتائج الدراسات التى أجريت على القوى النووية القصيرة التأثير فى مجال الطاقات غير العالية نسبيا ، لا تتوقف على شكل الحاجز الكمونى وإنما بشكل رئيسى بارتفاعه (أى V_0) وبنصف قطر التأثير (أى المسافة a) . وبما أن الحاجز الكمونى التربيعى (أو الحفرة الكمونية) يمثل أبسط شكل من أشكال القوى قصيرة التأثير فيمكن بالتالى تقريبه إلى قوى نووية . ولندرس الحالة الخاصة عندما $ka \ll 1$ وهذا يعنى فيزيائيا ، أن طول موجة دوبرويل أكبر بكثير من نصف قطر الحاجز الكمونى أى أن :

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \gg 2\pi a \qquad (14.41)$$

ولنحسب أولا طور التبدد δ_l بدلالة l بواسطة العلاقة التقريبية (11.60) وعندما يكون $kr \leqslant ka$ يكتب تابع بسل فى (11.60) كما يلى :

$$J_{l+1/2}(kr) \approx \left(\frac{kr}{2}\right)^{l+1/2} \frac{1}{\Gamma(l+3/2)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, \frac{(kr)^{l+1/2}\, 2^l l!}{(2l+1)!} \qquad (14.42)$$

وعندئذ نجد أن δ_l يساوى

$$\delta_l = \delta_0 \frac{3}{2l+3} \left(\frac{2^l l!}{(2l+1)!}\right)^2 (ka)^{2l} \qquad (14.43)$$

حيث

$$\delta_0 = -\frac{2m_0 V_0}{\hbar^2} \frac{a^3 k}{3} \qquad (14.44)$$

ومنه نرى أن الموجة s $(l=0)$ تعطى القسم الرئيسى فى الطور δ_l . أما الأمواج الجزئية $l = 1$ (الموجة p) و $l = 2$ (الموجة d) إلخ . . . فيتناقص مساهمتها فى الطور بحوالى $(ka)^{2l}$ مرة أصغر من δ_0 ولهذا يمكن اهمالها فى التقريب الأول ، وأما المقطع الفعال الناتج عن الموجة الأولى فيساوى طبقا لـ (14.35) إلى :

$$\sigma_0 = \frac{16\pi m_0^2 V_0^2 a^6}{9\hbar^4} \qquad (14.45)$$

وهو عمليا يمثل المقطع الكلي الفعال ، ويمكن الحصول على نتيجة مشابهة عندما نحسب σ فى التقريب البورنى بالعلاقة (14.12) . ولنحسب أخيرا طور التبدد من المعادلات الدقيقة وسنقتصر على حساب الطور للموجة s $(l = 0)$ التى تعطى ، كما رأينا سابقا ، القسم الأكبر فى المقطع الفعال عندما $ka \ll 1$ ، أما لحساب التوابع القطرية عندما تعطى طاقة الكمون بالعلاقة (11.53) ، فطبقا لـ (14.40) نجد المعادلتين التاليتين :

$$u'' + k^2 u = 0 \quad (r > a)$$
$$u'' - \varkappa'^2 u = 0 \quad (r < a) \qquad (14.46)$$

حيث

$$u = rR_0, \quad k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} E, \quad \varkappa'^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}(V_0 - E) = \varkappa^2 - k^2 \qquad (14.47)$$

وبالاضافة إلى ذلك سنفرض تحقق الشرط التالى :

$$V_0 > E > 0 \qquad (14.48)$$

وعندئذ يمكن كتابة الحل (14.46) بالشكل التالى :

$$u = A \sin(kr + \delta_0) \quad (r > a)$$
$$u = B \operatorname{sh} \varkappa' r \quad (r < a) \qquad (14.49)$$

وقد تم اختيار الحلين السابقين بحيث ينعدم التابع u عندما $r \to 0$ ، وإذا ساوينا التوابع الموجية ومشتقاتها على الحد $r = a$ فيمكن حساب الطور s المطلوب بالعلاقة الآتية :

$$\delta_0 = \operatorname{arctg}\left(\frac{ka}{\varkappa' a} \operatorname{th} \varkappa' a\right) - ka \qquad (14.50)$$

ويمك تبسيط هذه العلاقة عندما $(\varkappa a \gg ka)$ و $(V_0 \gg E)$ فتصبح كما

$$\delta_0 \approx ka\left(\frac{\operatorname{th} \varkappa a}{\varkappa a} - 1\right) \qquad (14.50a)$$

حيث

$$\varkappa a = \sqrt{\frac{2m_0 V_0}{\hbar^2}}\, a \qquad (14.51)$$

وإذا عوضنا (14.50a) فى (14.35a) واعتبرنا أن القسم الرئيسى ينتج عن التبدد s عندما $ka \ll 1$ فإننا نجد لحساب المقطع الفعال العبارة التالية :

$$\sigma_0 = 4\pi a^2 \left(\frac{\operatorname{th} \varkappa a}{\varkappa a} - 1\right)^2 \qquad (14.52)$$

وعندما يكون

$$\varkappa a \ll 1 \qquad (14.53)$$

يمكن أن نعتبر المساواة التالية :

$$\frac{\text{th}\,\varkappa a}{\varkappa a} \approx 1 - \frac{1}{3}(\varkappa a)^2$$

صحيحة . وعندئذ إذا عوضنا العلاقة الأخيرة فى (14.52) نجد المقطع الفعال σ_0 الموافق للتقريب البورنى ، انظر (14.45) ، أما عندما $\varkappa a >> 1$ ($V_0 \to \infty$ مثلا) فيأخذ المقطع الفعال قيمته العظمى

$$\left(\frac{\text{th}\,\varkappa a}{\varkappa a} = \frac{1}{\varkappa a} \to 0\right)$$

ويساوى عندئذ ، انظر أيضا (14.16) ، إلى

$$\sigma_0 = 4\pi a^2 \qquad (14.54)$$

أى أن المقطع الفعال أكبر بأربع مرات من القيمة الكلاسيكية التى تساوى سطح المقطع العرضى الناتج عن حاجز الكمون الكروى ($\sigma_{cl} = \pi a^2$) .

وسبب هذه النتيجة ، التى تبدو غريبة للوهلة الأولى ، هو أنه يجب حساب التبدد مرتين فى الأولى نعتبر الكرة صلبة (غير نفاذة) وفى الثانية أن الكرة المبددة تقتطع من الحزمة أسطوانة سطح قاعدتها πa^2 وبالتالى يختل انتظام توزع تبدد الموجة المستوية . فلو تناثرت الجسيمات التقليدية لاستمرت بالحركة بشكل منتظم ومستقيم خارج الكرة تاركة الفراغ الاسطوانى خاليا من أى شىء . والأمواج تفعل ذلك فهى تشكل الفراغ السابق بشكل جزئى (انعراج) ولهذا يحدث تبدد جديد لها وبالتالى يتضاعف المقطع الفعال وتبقى مثل هذه الظواهر الانعراجية حتى عندما ($ka >> 1$) ($\lambda \to 0$) ، ويؤدى حساب كل الأمواج الجزئية عندئذ إلى قيمة مضاعفة مرتين للمقطع الفعال بالمقارنة مع المقطع الكلاسيكى وهى $\sigma = 2\pi a^2$.

ولا يمكن الحصول على العلاقة (14.54) فى التقريب البورنى ومنه نستنتج حدود تطبيق هذا التقريب ، أى أن :

$$\varkappa a \ll 1 \quad \frac{2m_0V_0a^2}{\hbar^2} \ll 1$$

والتى تتطابق مع العبارة المقابلة $ka << 1$ التى حصلنا عليها سابقا ، انظر

(14.28) ، ومن السهل تعميم العلاقات الأخيرة فى حالة التبدد فى الحفرة الكمون المتناظرة كرويا وعندئذ يجب اجراء التغيير $V_0 \to -V_0$ فى العلاقة (14.40) فإذا أجرينا الحساب فى التقريب البـورنى فيمكن الحصول على النتيجة (14.45) لأن مربع V_0 لا يتغير عند اجراء التغيير السابق أما إذا أجرينا الحساب من أجل القيم الكبيرة لـ V_0 فلا بد من اجراء التغيير $x \to ix$ عند تغيير اشارة V_0 . وعندئذ نجد لحساب الطور الصفرى بدلا من (14.50) العلاقة التالية :

$$\delta_0 = \operatorname{arctg}\left(\frac{ka}{\varkappa' a} \operatorname{tg} \varkappa' a\right) - ka \qquad (14.55)$$

حيث

$$\varkappa'^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}(V_0 + E) = \varkappa^2 + k^2$$

وبمقارنة العلاقتين (14.55) و (14.50) نرى أننا نحصل على مقادير مشابهة للأطوار وبالتالى للمقاطع الفعالة عندما يكون $\varkappa' a$ صغيرا . وعندما تزداد V_0 (وكذلك $\varkappa' a$) فإن المقدار $\frac{\varkappa' a}{\varkappa' a} \operatorname{th}$ يتناقص طرديا فى حالة الحاجز الكمونى ، وفى نفس الوقت نرى المقدار المقابل فى حالة الحفرة الكمونية أى $\frac{\varkappa' a}{\varkappa' a} \operatorname{tg}$ يبدأ بالتغير دوريا من الصفر حتى اللانهاية ، وفى الحالة عندما $\varkappa' a = \frac{\pi}{2}$ يتحول الطور إلى $\frac{\pi}{2}$ $(\sin \delta_0 = 1)$. أما المقطع الفعال المقابل للموجة s فيأخذ القيمة التجانبية التالية :

$$\sigma_0 = \frac{4\pi a^2}{k^2 a^2}$$

وهو ما يفوق عدة مرات المقطع الفعال التقليدى عندما $ka \ll 1$ ويجب أن تحدث تجاوبات مشابهة عند تبدد المتوافقات ، وسنهمل الحسابات التفصيلية هنا . هذا ويمكن أن تظهر الخواص الأساسية ، التى رأيناها فى هذا المثال البسيط ، بشكل كوانتى عندما يتم التبدد على الكمونات الأخرى ذات التأثير القصير .

هـ) التبدد فى حقل كولونى . لندرس أولا تبدد تيار من الجسيمات بشحنة $Z'e_0$ فى حقل نواة شحنتها Ze_0 ، حيث تتعين طاقة التفاعل فى هذه الحالة بقانون كولون :

$$V(r) = \frac{ZZ'e_0^2}{r} \qquad (14.56)$$

وخلافا للكمونات القصيرة التأثير مثل كمون يوكاوا نرى أن الكمون السابق يتضاءل ببطء مع المسافة r وهذا يؤدى ، كما سنرى فيما يلى ، إلى تغير جذرى فى سلوك التابع الموجى فى المجال التقاربى لـ r الكبيرة . وتقابل مسألة التبدد فى الحقل الكولونى (14.56) المدارات القطعية الزائدية فى الميكانيكا الكلاسيكية حيث تكون طاقة الجسيم $E > 0$ ، ويمكن أن تحل هذه المسألة فى الميكانيكا الكوانتية بدقة كما حلت فى مسألة كبلر ، انظر البند ١٢ . وقد يكون من الأسهل الانتقال من الاحداثيات الكروية إلى الاحداثيات القطعية المكافئية طالما أن عملية التبدد تفرض تناظرا محوريا بالنسبة لاتجاه الجسيمات الواردة (المحور Z) وبالتالى نكتب :

$$\begin{aligned} \xi &= r + z = r(1+\cos\vartheta) \\ \eta &= r - z = r(1-\cos\vartheta) \\ \varphi &= \operatorname{arctg}\frac{y}{x} \end{aligned} \qquad (14.57)$$

فى هذه الاحداثيات يمكن فصل المتحولات فى معادلة شرودينجر للحقل الكولونى كما رأينا فى البند ١ . ولا يجوز أن يتعلق القسم الزاوى $\Phi(\varphi)$ للتابع الموجى ، عندما يكون الحل متناظر محوريا، بـ φ ولهذا نكتب أن :

$$\Phi(\varphi) = \text{const} = 1 \qquad (14.58)$$

وعليه يمكن أن يوضع التابع الموجى الكلى ψ بشكل جداء ، أى أن :

$$\psi = f_1(\xi) f_2(\eta) \qquad (14.59)$$

حيث يحقق التابعان $f_1(\xi)$ و $f_2(\eta)$ المعادلتين :

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi \frac{df_1}{d\xi}\right) + \left[\frac{k^2}{4}\xi + B_1\right] f_1 = 0$$
$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta \frac{df_2}{d\eta}\right) + \left[\frac{k^2}{4}\eta + B_2\right] f_2 = 0 \qquad (14.60)$$

وحيث $k = \sqrt{\frac{2m_0E}{\hbar^2}}$ و $E > 0$ ويرتبط ثابتا الفصل B_1 و B_2 بالعلاقة

$$B_1 + B_2 = -m_0 \frac{ZZ'e_0^2}{\hbar^2} \qquad (14.61)$$

وسنبحث عن الحل الخاص للمعادلة (14.60) الذى يحقق تقاربا للتابع ψ (14.59) ، عندما $z \to \infty$ ، بالشكل التالى :

$$\psi \simeq e^{ikz}, \quad z \to -\infty \qquad (14.62)$$

وهذا ما يقابل موجة مستوية تسقط من اللانهاية بالاتجاه الموجب للمحور z على المركز الكولونى ، فيما يأخذ هذا الشرط فى الاحداثيات القطعية المكافئة الشكل التالى :

$$\psi \simeq e^{ik(\xi-\eta)/2} \qquad (14.63)$$

وذلك عندما $n \to \infty$ ومهما كانت ξ . ولهذا نختار الحل الخاص للتابع $f_1(\xi)$ بالشكل التالى :

$$f_1(\xi) = e^{i\xi\frac{k}{2}} \qquad (14.64)$$

وهوالحل الذى يحقق (14.60) إذا وضعنا :

$$B_1 = -\frac{i}{2}k \qquad (14.65)$$

وعندئذ لكى يحقق التابع $f_2(\eta)$ الشرط التقاربى (14.63) يجب أن يكتب بالشكل :

$$f_2(\eta) \simeq e^{-ik\frac{\eta}{2}}, \quad \eta \to \infty \qquad (14.66)$$

ولنبدل المتحول η فى المعادلة الثانية من (14.60) بمتحول جديد عديم الأبعاد وهو

$$\rho = k\eta \qquad (14.67)$$

ولكى يتحقق الشرط (14.66) سنبحث عن الحل بالشكل :

$$f_2(\rho) = e^{-i\frac{\rho}{2}} u(\rho) \qquad (14.68)$$

وعندئذ نحصل لحساب $u(\rho)$ على المعادلة التالية :

$$\rho u'' + (1 - i\rho) u' - \gamma u = 0$$

حيث

$$\gamma = \frac{ZZ'e^2 m_0}{\hbar^2 k} \qquad (14.69)$$

ويحقق التابع المتسامى المنطبق ، انظر أيضا (12.29) ، التالى :

$$\Phi(\alpha, \beta, x) = 1 + \frac{\alpha}{\beta}\frac{x}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)}\frac{x^2}{2!} + \ldots \qquad (14.70)$$

المعادلة (14.69) عندما تأخذ α و β و x القيم التالية :

$$\alpha = -i\gamma, \quad \beta = 1, \quad x = i\rho \qquad (14.71)$$

ولهذا نحصل لحساب ψ على الحل الخاص التالى :

$$\psi = Ce^{ik\frac{\xi}{2}} e^{-i\frac{\rho}{2}} \Phi(-i\gamma, 1, i\rho) \qquad (14.72)$$

حيث C ثابت المعايرة . ان هذا الحل محدود فى المجال $\rho \to 0$ ويتعين سلوكه عندما $\rho \to \infty$ بالتابع المتقارب Φ فى هذا المجال ، ولقد كتبنا الصيغة التقاربية (12.30) للتابع الموجى المتسامى المنطبق $\Phi(\alpha, \beta, x)$ عندما

$|x| \to \infty$ وعند تطبيقها على (14.71) يجب عند أخذ الأس من المتحولات x و $-x$ ، ان نعتبر هذه المتحولات فى أصغر قيمها ، أى أن :

$$(-x)^{-\alpha} = e^{\pi\frac{\gamma}{2}} e^{i\gamma \ln \rho}$$
$$x^{\alpha-\beta} = -\frac{i}{\rho} e^{\pi\frac{\gamma}{2}} e^{-i\gamma \ln \rho} \qquad (14.73)$$

فإذا اعتبرنا صحة هذه المساواة فإننا نحصل عند نشر (12.30) من أجل قيم ρ الكبيرة جدا $(\rho >> 1)$ على ما يلى :

$$\Phi(-i\gamma, 1, i\rho) \simeq \frac{e^{\pi\frac{\gamma}{2}}}{\Gamma(1+i\gamma)} e^{i\gamma \ln \rho}\left[1 + \frac{\gamma^2}{i\rho} + \dots\right] -$$
$$- \frac{e^{\pi\frac{\gamma}{2}}}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{\gamma}{\rho} e^{i\rho - i\gamma \ln \rho}\left[1 + \frac{(1+i\gamma)^2}{i\rho} + \dots\right] \qquad (14.74)$$

وبواسطة هذا النشر نحصل على القيمة التقاربية للتابع Ψ فى (14.72) عندما $z \to -\infty$ $(\rho \to +\infty)$

$$\psi \simeq C \frac{e^{\pi\frac{\gamma}{2}}}{\Gamma(1+i\gamma)} e^{ikz + i\gamma \ln \rho} \qquad (14.75)$$

ان وجود الحد اللوغاريتمى $i\gamma \ln \rho$ فى الأس يشوه الموجة المستوية حتى فى اللا نهاية ، فإذا فرضنا أن

$$C = e^{-\pi\frac{\gamma}{2}} \Gamma(1+i\gamma) \qquad (14.76)$$

نجد أن الشرط التقاربى المطلوب فى (14.62) يتحقق بالتقريب إلى المقدار $\gamma \ln \rho$. ولنبحث الآن عن السلوك التقاربى للتابع Ψ فى (14.72) عندما $r \to \infty$ بحيث يشمل هذا البحث كلا الموجتين الواردة والمتبددة ، وفى هذه الحالة $(\eta = r - z \to \infty)$ يطبق التقارب (14.74) أيضا ، الذى بواسطته

سنجد إذا انتقلنا إلى الاحداثيات الأساسية r و ϑ وأخذنا بعين الاعتبار (14.76) ، أن للتابع ψ عندما $r\to\infty$ الصيغة التالية :

$$\psi \simeq \left[1 + \frac{\gamma^2}{ikr(1-\cos\vartheta)} + \ \ldots\right] e^{ikz + i\gamma \ln kr(1-\cos\vartheta)} -$$
$$- \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{\gamma}{2kr\sin^2\frac{\vartheta}{2}} e^{ikr - i\gamma \ln kr(1-\cos\vartheta)} \left[1 + \frac{(1+i\gamma)^2}{ikr(1-\cos\vartheta)} + \ldots\right]$$

(14.77)

ومن الواضح امكانية تطبيق هذا النشر على الزوايا الصغيرة ، وهى تلك التى تحقق العلاقة :

$$\frac{\gamma^2}{kr(1-\cos\vartheta)} \ll 1, \quad \frac{1}{kr(1-\cos\vartheta)} \ll 1 \qquad (14.78)$$

ولا يصبح هذا التقريب صحيحا ، عندما تزداد r وعلى مسافات كبيرة عن المركز الكولونى حيث لا يتحقق من الناحية العملية ، أما إذا أهملنا الحدود الصغيرة فى (14.77) مع اعتبار المتراجحات (14.78) فيمكن كتابة التابع الموجى بالشكل التالى :

$$\psi \simeq e^{ikz + i\gamma \ln[kr(1-\cos\vartheta)]} + \frac{f(\vartheta)}{r} e^{ikr - i\gamma \ln 2kr} \qquad (14.79)$$

حيث يمثل الحد الأول الموجة النافذة (لا المستوية وإنما المشوهة بالحد اللوغاريتمى) ، أما الحد الثانى فيمثل الموجة الكروية المتبددة والمشوهة بالحقل الكولونى المتعلق بـ r . أما سعة التبدد $f(\vartheta)$ فى الحقل الكولونى طبقا لـ (14,77) فتساوى إلى :

$$f(\vartheta) = - \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{\gamma e^{-i\gamma \ln \sin^2\frac{\vartheta}{2}}}{2k\sin^2\frac{\vartheta}{2}} \qquad (14.80)$$

وإذا حسبنا المقطع التفاضلى الفعال للتبدد بالعلاقة العامة (14.34) أى أن :

$$d\sigma = |f(\vartheta)|^2 d\Omega$$

فيمكن أن لا تظهر تابعية المقطع الفعال إلى الطور اللوغاريتمى وسنجد أن :

$$d\sigma = \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}} d\Omega = \frac{(ZZ')^2 e_0^4 m_0^2}{4p^4 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}} d\Omega \qquad (14.81)$$

أى أننا نحصل على علاقة رذرفورد (14.24) لتبدد الشحنة $Z'e_0$. ويختلف التابع الموجى (14.79) الذى حصلنا عليه من التابعين الموجيين القابلين (14.30) و (14.32) اللذين حصلنا عليهما فى حالة القوى قصيرة التأثير لأنه يحوى حدا اضافيا لوغاريتميا يتعلق بـ r و ϑ يجب أخذه بعين الاعتبار عند نشر سعة التبدد (14.80) بالأمواج الكروية (14.33) فى الحقل الكولونى . ولنحسب تكامل المقدار الناتج عن جداء السعة $f(\vartheta)$ (14.80) فى كثير حدود ليجاندر $P_l(\cos\vartheta)$ أى :

$$ik \int_{\vartheta_0}^{\pi} d\vartheta \sin \vartheta f(\vartheta) P_l(\cos \vartheta) =$$

$$= - i\gamma \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} 2^{i\gamma} \int_{-1}^{\cos \vartheta_0} dx (1-x)^{-1-i\gamma} P_l(x) = S_l \qquad (14.82)$$

حيث اخترنا زاوية معينة $\vartheta_0 \ll 1$ كحد أدنى للتكامل بـ ϑ بحيث تتحقق المتراجحة (14.78) عندما $\vartheta > \vartheta_0$ وهى المتراجحة التى تكفل صحة النشر التقاربى للتابع الموجى . فإذا ضربنا كلا من طرفى المساواة (14.82) بـ$P_l(\cos\vartheta')$ حيث ($\vartheta' > \vartheta_0$) ثم جمعنا بـ l واستعملنا شرط انغلاق كثير حدود ليجاندر التالى :

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\cos \vartheta) P_l(\cos \vartheta') = \delta(\cos \vartheta - \cos \vartheta') \qquad (14.83)$$

نجد للسعة الصيغة التالية :

$$f(\vartheta)=\frac{1}{ik}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{2}S_l P_l(\cos\vartheta) \qquad (14.84)$$

مع العلم أن $\vartheta > \vartheta_0$. أما إذا أردنا الحصول على نشر $f(\vartheta)$ بكثيرات حدود ليجاندر كما فى (14.33) فيجب حذف ϑ_0 فى التكامل δ_l وذلك بكتابة $\vartheta_0 \to 0$. ويؤدى هذا الانتقال $(\vartheta_0 \to 0)$ فى (14.82) إلى عدم تعيين من الشكل $\vartheta_0^{-2i\gamma}$ مرتبطا بعدم امكانية تطبيق (14.80) على $f(\vartheta)$ عندما $\vartheta = 0$ ويمكن تجنب هذه الصعوبة بالقيام بما يلى : نغير γ فى التكامل (14.82) بمقدار عقدى (مركب) يحوى على إضافة عقدية صغيرة بالشكل $\gamma \to \gamma + i\varepsilon$ حيث $\varepsilon > 0$. عندئذ يكون الانتقال $\vartheta_0 \to 0$ مكافئا لحساب التكامل التالى :

$$\int_{-1}^{1} dx\,(1-x)^{-1+\varepsilon-i\gamma} P_l(x) \qquad (14.85)$$

وبعدئذ ينتهى ε إلى الصفر . ولنكتب كثير الحدود $P_l(x)$ بشكله التفاضلى :

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l (x^2-1)^l}{dx^l}$$

ثم نحسب التكامل بالتجزئة l مرة ، وعندئذ نجد أن

$$\int_{-1}^{1} dx\,(1-x)^{\lambda} P_l(x) =$$

$$=(-1)^l \frac{\lambda(\lambda-1)\ldots(\lambda-l+1)}{2^l l!}\int_{-1}^{1}(1-x)^{\lambda}(1+x)^l\,dx \qquad (14.86)$$

حيث $\lambda = -1+\varepsilon-i\gamma$. وإذا استفدنا الآن من التكامل

$$\int_{-1}^{1}(1-x)^{\lambda}(1+x)^l\,dx = 2^{l+\lambda+1}\frac{\Gamma(l+1)\,\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(\lambda+l+2)}$$

الذى يكون صحيحا عندما $\text{Re}\lambda > -1$ ثم عوضنا هذا التكامل فى (14.86) وانهينا ε للصفر نجد أن :

$$\int_{-1}^{1} dx\,(1-x)^{-1-i\gamma+\varepsilon}\,P_l(x) = \frac{2^{-i\gamma}(1+i\gamma)(2+i\gamma)\ldots(l+i\gamma)\,\Gamma(-i\gamma)}{\Gamma(l+1-i\gamma)} \quad \varepsilon\to 0 \qquad (14.87)$$

وبما أن $-i\gamma\Gamma(-i\gamma) = \Gamma(1-i\gamma)$ نستنتج أخيرا :

$$S_l = \frac{\Gamma(l+1+i\gamma)}{\Gamma(l+1-i\gamma)} \qquad (14.88)$$

وهكذا يمكن كتابة نشر السعة بالشكل الآتى :

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,\frac{\Gamma(l+1+i\gamma)}{\Gamma(l+1-i\gamma)}\,P_l(\cos\vartheta) \qquad (14.89)$$

ويعتبر هذا النشر صحيحا عندما $\vartheta > 0$. ومن السهل ملاحظة أن هذا النشر مطابق للعلاقة العامة (14.33) ولذلك يستوجب مراعاة العلاقة (14.83) عندما $\vartheta \neq 0$ أى

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,P_l(\cos\vartheta) = 0$$

ويمكن حساب الطور δ_l بمقارنة (14.89) مع (14.33) فنجد أن :

$$\delta_l = -\arg\Gamma(l+1-i\gamma) \qquad (14.90)$$

وهنا يجدر بنا ملاحظة اختلاف الطور δ_l عن طور التبدد الكلى بمقدار

معين هو اللوغاريتم الكولونى ، انظر (14.79) ، الذى يزداد بزيادة r ولكنه لا يتعلق بـ l . وإذا بحثنا من البداية عن حل معادلة شرودينجر ، المقابل لعزم مدارى معين l ، لأمكن عندئذ كتابة معادلة شرودينجر للتابع القطرى $u = rR_l$ بالشكل التالى :

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{2\gamma k}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u = 0 \qquad (14.91)$$

وعندما تأخذ r قيما كبيرة جدا بحيث يمكن اهمال الحد $\frac{u}{r^2}$ ، نرى أن الحل التقاربى للمعادلة (14.91) يأخذ الشكل الآتى :

$$R_l = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\sin\left(kr - \gamma \ln 2kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)}{r} \qquad (14.92)$$

وليس من الصعب التحقق من ذلك إذا عوضنا العلاقة الأخيرة فى (14.91) ، وعندئذ لا يختصر الحد الأساسى المتناسب مع u فقط وإنما الحد المتناسب مع $\frac{u}{r}$ بسبب الطور اللوغاريتمى $\gamma \ln 2kr$ ، ولقد كتبنا الطور $\frac{\pi l}{2}$ لكى ينعدم الطور δ_l أيضا عندما $0 = \gamma$ وذلك لأن الحل التقاربى (14.92) يجب أن يتحول إلى الحل التقاربى لجسيم حر . ولحساب الطور δ_l يجب أولا كتابة الحل الدقيق للمعادلة (14.91) الذى يكون صحيحا من أجل قيم r الصغيرة أو الكبيرة مع العلم أنه يمكن التعبير عن هذا الحل بواسطة التوابع المتسامية الموحدة $\Phi(\alpha, \beta, y)$ (14.70) بالشكل التالى :

$$R_l = \text{const}\, r^l e^{-ikr}\Phi(l + 1 - i\gamma,\ 2l + 2,\ 2ikr)$$

وبدراسة التابع Φ عندما $r \to \infty$ والذى تستنتج منه الصيغة التقاربية (12.30) نجد أن

$$R_{l \atop r\to\infty} = \frac{\text{const}}{r}\left[\frac{e^{i\left(kr-\frac{\pi}{2}l-\gamma\ln 2kr\right)}}{i\Gamma(l+1-i\gamma)} - \frac{e^{-i\left(kr-\frac{\pi}{2}l-\gamma\ln 2kr\right)}}{i\Gamma(l+1+i\gamma)}\right]$$

فإذا فرضنا بعد ذلك أن :

$$\Gamma(l+1\mp i\gamma) = |\Gamma(l+1-i\gamma)|e^{\mp i\delta_l}$$

$$\delta_l = -\arg\Gamma(l+1-i\gamma) \qquad (14.93)$$

نحصل على الشكل التقاربى (14.92) ، ولكن بطور معطى δ_l يتطابق مع القيمة (14.92) المستنتجة سابقا وعندما $|l - i\gamma| \gg 1$ وباستخدام علاقة ستيرلينج

$$|\Gamma(l+1-i\gamma)|e^{-i\delta_l} \approx \sqrt{2\pi}\left(\frac{l+1/2-i\gamma}{e}\right)^{l+1/2-i\gamma}$$

يمكن الحصول على قيمة الطور التالية :

$$\delta_l \approx (l+1/2)\,\text{arctg}\frac{\gamma}{l+1/2} + \gamma\left(\ln\sqrt{(l+1/2)^2+\gamma^2}-1\right) \qquad (14.94)$$

وهو ينتهى إلى الصفر عند $\gamma\to 0$ (غياب القوى الكولونية) ، وهذا ما يمكن التنبؤ به مقدما .

البند ١٥ ـ طريقة ريجى فى نظرية التبدد

أ) **مفهوم أقطاب ريجى** . عند دراسة حركة الجسيمات فى حقل متناظر ، فيما يتعلق بمسألة التبدد ، تبدو طريقة ريجى مفيدة جدا ، تلك الطريقة التى تتلخص فى اعتبار التابع الموجى وسعة التبدد كتوابع لمتحول العزم الحركى التخيلى l . ولنبرهن كيف يمكن أن نقيم العلاقة بين مسألة

التبدد ومسألة البحث عن سويات الطاقة المتقطعة للحالات المرتبطة فى الحقل $V(r)$ بطريقة ريجى . ولذلك نكتب معادلة شرودينجر (11.53) للتابع القطرى $u = rR(r)$ فى حقل متناظر مركزى $V(r)$:

$$\frac{d^2u_l}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{2m_0}{\hbar^2} V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u_l = 0 \qquad (15.1)$$

حيث :

$$k^2 = 2m_0E/\hbar^2$$

أن الحل العام لهذه المعادلة عندما تكون r صغيرة وحيث يمكن اهمال الحد $k^2 - 2m_0V(r)/h^2$ ، انظر (12.12) ، هو من الشكل

$$u_l \underset{r\to 0}{\simeq} C_1r^{l+1} + C_2r^{-l}$$

فإذا استبعدنا الحل غير المحدود عندما $r = 0$ بكتابة $C_2 = 0$ واعتبرنا $C_1 = 1$ نجد أن :

$$u_l \simeq r^{l+1}, \quad r \to 0 \qquad (15.2)$$

وسنعتبر أيضا أن l يمكن أن تأخذ قيما تخيلية اختيارية وعندئذ لا يمكن عزل الحد الثانى عن الأول إلا عندما

$$\mathrm{Re}\,(l+1) > \mathrm{Re}\,(-l)$$

حيث Re هو القسم الحقيقى أى أن :

$$\mathrm{Re}\,(l + {}^1\!/_2) > 0 \qquad (15.3)$$

فإذا كان $\mathrm{Re}\,(l + {}^1\!/_2) < 0$ فإن الحل الثانى يتضاءل أسرع من الأول ويمكن اضافته دائما إلى الأول دون أن يتغير السلوك التقاربى للتابع u_l من

أجل القيم الصغيرة لـ r ومن الواضح عندئذ أنه لا يجوز اختيار حل وحيد ، وهكذا يكون التابع u_l وحيد التعيين كحل للمعادلة (15.1) ضمن الشروط الحدية (15.2) وتحقق (15.3) ، ولندرس الآن السلوك التقاربى لـ u_l عندما $r \to \infty$ وعندئذ ينتهى الكمون $V(r)$ فى المعادلة (15.1) إلى الصفر ويمكن اهمال الحدود المتناسبة معه وكذلك الحد $l(l+1)/r^2$ ، وبالتالى نجد أن :

$$\frac{d^2u_l}{dr^2} + k^2u_l = 0 \qquad (15.4)$$

والحل العام لهذه المعادلة :

$$\underset{r \to \infty}{u_l} = f_l(k^2)\, e^{-ikr} + g_l(k^2)\, e^{ikr} \qquad (15.5)$$

وهو يصف السلوك التقاربى لأى حل للمعادلة (15.1) وخاصة الحل المبحوث عنه والذى يحقق الشروط الحدية (15.2) مع اعتبار أن الحقل $V(r)$ يتضاءل فى اللانهاية أكثر مما يتضاءل الحقل الكولونى ، وبما أن المعادلة (15.1) والشروط الحدية (15.2) تتضمن تبعية تحليلية للوسيط l وبالتالى فالحل $u_l(r)$ يجب أن يكون تابعا تحليليا للمتحول l ، فعندما يكون l حقيقيا و $k^2 > 0$ ينتج من شرط حقيقية التابع u_l ما يلى :

$$g_l = f_l^* \qquad (15.6)$$

فإذا كان l عقديا نحصل من (15.2) على أن :

$$u_{l^*}(r) = u_l^*(r) \qquad (15.7)$$

ولهذا تتغير العلاقة (15.6) عندما يكون $k^2>0$ وتصبح بالشكل التالى :

$$g_{l^*} = f_{l^*}^* \qquad (15.8)$$

ومن جهة أخرى نرى أنه يمكن كتابة التابع $u_l = rR_l$ ، عندما $r \to \infty$ طبقا

للعلاقة التى حصلنا عليها سابقا ، بالشكل التالى:

$$u_l(r)_{r\to\infty} = C_l \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right) = = -\frac{C_l}{2i} e^{-i\pi l/2 + i\delta_l}\left(e^{-ikr} - e^{-i\pi l + 2i\delta_l} e^{ikr}\right) \qquad (15.9)$$

ومن الضرورى عندئذ التأكيد على أن الطور σ_l لن يكون حقيقيا عندما تأخذ l قيما عقدية . وإذا قارنا (15.9) مع (15.5) نحصل على علاقة لحساب التابع الذى سيدخل فى نشر سعة التبدد $f(\vartheta)$ للأمواج الجزئية وهو التابع :

$$S_l = e^{2i\delta_l}$$

ولحسابه نحصل على العلاقة التالية :

$$S_l = e^{2i\delta_l} = -\frac{g_l}{f_l} e^{il\pi} \qquad (15.11)$$

التى تمثل التعيميم التحليلى للتابع S_l على المجال العقدى للمتحول l ، وإذا لاحظنا (15.8) ، عندما تكون l عقدية ، نجد علاقة أخرى عوضا عن $|S_l|^2 = 1$ وهى العلاقة التالية :

$$S_l S^*_{l^*} = 1 \qquad (15.12)$$

حيث يمثل التابع $u_l(r)$ ومعه f_l و g_l التابع التحليلى لـ l فى نصف المستوى $Rel > -1/2$، ولهذا لن يكون للتابع S_l فى هذا المجال أى شذوذ سوى بعض الأقطاب فى النقط التى ينعدم فيها f_l أى :

$$f_l(k^2) = 0 \qquad (15.13)$$

وسنرقم حلول هذه المعادلة بالوسيط i أى :

$$l = \alpha_i(k^2) \qquad (15.14)$$

وتسمى أقطاب التابع S_l فى المستوى l العقدى بأقطاب « ريجى » أما

التوابع $\varphi_l\,(k^2)$ التى تعين أقطاب ريجى عند تغير الطاقة فتسمى بمسارات ريجى . ولنبرهن الآن أن أقطاب ريجى تقع فى نصف المستوى العلوى $\mathrm{Im}\, l > 0$ عندما $k^2 > 0$ ، ولهذا نكتب المعادلة (15.1) والمعادلة الشبيهة بها ، المقابلة للمرافق العقدى للقيمة l ، ثم نضرب المعادلة الأولى بـ u_{l^*} والثانية بـ u_l ونطرحهما ، فنجد أن :

$$u_{l^*}\frac{d^2u_l}{dr^2}-u_l\frac{d^2u_{l^*}}{dr^2}=(l-l^*)\,(l+l^*+1)\,\frac{u_lu_{l^*}}{r^2} \qquad (15.15)$$

ولنستكمل هذه المعادلة بالنسبة لـ r من الصفر حتى اللانهاية مع ملاحظة أن :

$$\int_0^\infty\left(u_{l^*}\frac{d^2u_l}{dr^2}-u_l\frac{d^2u_{l^*}}{dr^2}\right)dr=\left(u_{l^*}\frac{du_l}{dr}-u_l\frac{du_{l^*}}{dr}\right)\Big|_0^\infty$$

وبالتعويض بالحد الأدنى $r = 0$ ينعدم المقدار السابق بسبب الشرط $\mathrm{Re}\, l > -\frac{1}{2}$ أما ما يخص الحد الأعلى فإننا بتبديله بالحل التقاربى (15.5) نجد أن :

$$\underset{r\to\infty}{u_{l^*}}\frac{du_l}{dr}-u_l\frac{du_{l^*}}{dr}=2ik\,(g_lf_{l^*}-g_{l^*}f_l)$$

وباعتبار صحة العلاقة (15.7) نجد أخيرا :

$$2\,\mathrm{Im}\, l\cdot\mathrm{Re}\,(l+{}^1\!/_2)\int_0^\infty\frac{|u_l|^2}{r^2}\,dr=k\,(g_lf_{l^*}-g_{l^*}f_l) \qquad (15.16)$$

ويتقارب التكامل فى الطرف الأيسر وطبقا لـ (15.2) و (15.3) نجد العلاقتين التاليتين :

$$\frac{|u_l|^2}{r^2}\simeq r^{2l},\quad \mathrm{Re}\,2l>-1$$

أما عند الحد الأعلى فيتذبذب هذا التكامل حسب القانون (15.5) عندما $k^2 > 0$. ولنفرض أن l تقع على مسار ريجى $l = \alpha_l(k^2)$ عندما $k^2 > 0$ أى أن $E > 0$ وهذا يقابل الحالات المستقلة (غير المرتبطة) فى مسألة التبدد ،

وعندئذ إذا تذكرنا المساواة (15.8) واعتبرنا تحقق العلاقة $f_l = 0$ على مسارات ريجى فإننا نجد :

$$2\,\mathrm{Im}\, l \cdot \mathrm{Re}\,(l + 1/2) \int_0^\infty \frac{|u_l|^2}{r^2}\, dr = k\,|g_l|^2 \qquad (15.17)$$

ويتضح من هذه العلاقة صحة المتراجحة $\mathrm{Im}\, l > 0$ إذا كان $k < 0$ وكان $\mathrm{Re}\, l > -\frac{1}{2}$. ولندرس الآن مسارات ريجى عندما تكون E سالبة $k^2 < 0$ ولهذا نكتب

$$k = i\varkappa, \quad \varkappa > 0 \qquad (15.18)$$

وفى هذه الحالة نجد عوضا عن (15.5) عندما $r \to \infty$ الحل التالى :

$$\underset{r\to\infty}{u_l}(r) = g_l(-\varkappa^2)\, e^{-\varkappa r} + f_l(-\varkappa^2)\, e^{\varkappa r} \qquad (15.19)$$

على مسارات ريجى المحققة للعلاقة $l = \alpha_l(-\varkappa^2)$ حيث ينعدم المعامل $f_l(-\varkappa^2) = 0$ ولهذا ينعدم الحل الأسى المتزايد ويبقى عندما $r \to \infty$ الحل المتخامد التالى :

$$\underset{r\to\infty}{u_l}(r) = g_l e^{-\varkappa r} \qquad (15.20)$$

أما الشرط(15.7) عندما $k = i\varkappa \; (\varkappa > 0)$ فيؤدى إلى :

$$g_{l^*} = g_l^*, \quad f_{l^*} = f_l^*$$

وعندئذ ينتج من (15.16) ، حيث يظهر بوضوح تقارب التكامل طبقا لـ (15.20) أن $\mathrm{Im}\, l = 0$ ، أى أن أقطاب ريجى تقع على محور حقيقى . بينما يأخذ المقدار l حيث $l = \alpha_l(-\varkappa^2)$ ، وعند تغيره على محور حقيقى ، قيما فيزيائية ، أى أن هذه القيم تساوى أعدادا صحيحة موجبة ، أى أن :

$$l = \alpha_l(-\varkappa^2) = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots \qquad (15.21)$$

وعندئذ يصف التابع $u_l(r)$ الحالات المرتبطة للجملة التى تتخامد فى

اللانهاية طبقا لـ (15.20) والتى تقابل سويات طاقوية $E < 0$ تتعين بدورها من (15.21) . ويمكن أن تتوضع عدة حالات مرتبطة (على مسار واحد رقمه i) مقابلة للقيم $l = 0, 1, 2, \ldots$ وهى تؤلف فصيلة مميزة بالعدد الكوانتى i ، ويجب أن تتطابق السويات التى حصلنا عليها بهذه الطريقة مع طيف الطاقة الناتج عن حل معادلة شرودينجر . ولندرس كمثال على ذلك الحقل الكولونى الذى تتحقق فيه العلاقة المبرهنة سابقا ، أنظر (14.88) :

$$S_l = \frac{\Gamma(l+1+i\gamma)}{\Gamma(l+1-i\gamma)} \qquad (15.22)$$

حيث $\gamma = ZZ'e_0^2 m_0/\hbar^2 k$. ومن المعلوم أن التابع γ ينعدم عندما يساوى دليله عددا سالبا صحيحا أو صفرا ، ولهذا يجب أن تقع أقطاب التابع (15.22) على المسارات :

$$l + 1 - i\gamma = -n_r = 0, -1, -2, \ldots \qquad (15.23)$$

ونلاحظ إذن وجود عدد لانهائى من الحالات المرتبطة على كل مسار من مسارات ريجى تتميز بالعدد الكوانتى n_r ، أى أنها تتميز بعدد أصفار القسم القطرى R_l وقيم l المختلفة ، لأنه عندما $l \leqq 0, 1, 2, \ldots$ فإن المقدار $n_r + l + 1$ يأخذ القيم $n = 1, 2, 3, \ldots$. ولنفترض أن شحنة النواة $Z > 0$ وشحنة الجسيم $Z' = -1$ (الكترون) ، وبما أن

$$k = i\sqrt{-\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}$$

فإن يمكن الحصول من (15.23) على طيف طاقة الذرات الشبيهة بالهيدروجين (12.41) التالى :

$$E_n = -\frac{Z^2 e_0^4 m_0}{2\hbar^2 n^2}$$

وهكذا نجد طريقة أخرى ، مكافئة لمعادلة شرودينجر ، لدراسة الحالات الراسخة المرتبطة هى طريقة مسارات ريجى .

ب) **التجاوب (الطنين)** . نلاحظ أن أقطاب ريجى يمكن أن تعين ، بالاضافة إلى الحالات المرتبطة السابقة ، ما يسمى بالحالات شبه الراسخة أو حالات التجاوب التى تتميز بالقيم العقدية بالنسبة للطاقة ، أى أن :

$$E = E_0 - i\hbar\lambda/2$$

حيث $E_0 > 0$ أما المقدار الصغير $\lambda > 0$ فيساوى احتمال انحلال الطنين لأن مربع طويلة التابع الموجى يساوى احتمال الحالة التى ندرسها

$$w_0 = |\psi|^2 = \text{const}\, e^{-\lambda t}$$

وهى تتضاءل أسيا مع مرور الزمن ، أنظر أيضا العلاقة (5.130) ، ولا يبقى عندئذ فى الحل المتقارب ، عندما $r \to \infty$ ، سوى الموجة المتباعدة :

$$\underset{r \to \infty}{u_l} \simeq g_l e^{ikr}, \qquad k = \sqrt{\frac{2m_0E}{\hbar^2}}$$

وهذا يعنى بالضبط أنه نتيجة للانحلال يذهب الجسيم إلى اللانهاية ، ولتعيين ثابت الانحلال λ نفرض أن مسار ريجى يمر قريبا من المحور الحقيقى بجانب القيم الحقيقية الصحيحة الموجبة للعزم l_l :

$$\alpha(E_0) = l_0 = l_l + il_{ll} \qquad (15.25)$$

حيث $l_l = \text{Re}\alpha(E_0) = 0, 1, 2, \ldots$ أما التصحيح العقدى l_{ll} فهو ، طبقا لما برهناه سابقا ، مقدار موجب ($l_{ll} > 0$) وعندئذ يكون $l_{ll} \ll 1$. وهكذا يمكن النشر حول القطب l_0 كما يلى :

$$f_l(E) \simeq \left(\frac{\partial f_l}{\partial l}\right)_0 (l - l_0) + \left(\frac{\partial f_l}{\partial E}\right)_0 (E - E_0) \qquad (15.26)$$

وعلى مسارات ريجى ، حيث $f_{l_0}(E_0) = 0$ يكون

$$\left(\frac{\partial f}{\partial l_0}\right)_0 dl + \left(\frac{\partial f}{\partial E}\right)_0 dE = 0$$

أى

$$\frac{(\partial f/\partial E)_0}{(\partial f/\partial l)_0} = -\left(\frac{\partial l}{\partial E}\right)_0 = -\frac{\partial \alpha}{\partial E_0}$$

وعندئذ نجد فى النقط $l = l_l = 0, 1, 2, \ldots$ أن

$$f_l(E) = \left(\frac{\partial f_l}{\partial E}\right)_0 \left[E - E_0 + i l_{II} / \left(\frac{\partial \alpha}{\partial E_0}\right)\right] \qquad (15.27)$$

ان أصفار التابع $f_l(E)$ ، كما يتضح من هذه العلاقة ، تقابل القيم العقدية للطاقة من النوع (15.24) بالاضافة أن قيمة λ تعطى بالعلاقة :

$$\lambda = 2 l_{II} / \hbar \left(\frac{\partial \alpha}{\partial E_0}\right) \qquad (15.28)$$

ولكى تكون الحالة متخامدة مع الزمن يجب أن يكون المشتق $\partial\alpha/\partial E_0$ موجبا . وهكذا نرى أن الحالات المرتبطة تتعين بواسطة مسارات ريجى ، فعندما تقطع هذه المسارات المحور الحقيقى فى نقط تقابل قيما صحيحة موجبة l فإنها تعين الحالات المرتبطة ذات الطاقات السالبة ، وبازدياد قيم الطاقة حتى تصبح موجبة فإن مسارات ريجى تدخل نصف المستوى العقدى العلوى $\text{Im}\,l > 0$ مارة بالقيم الفيزيائية لـ l مما يسبب ظهور حالات الطنين . وان طريقة الأقطاب العقدية هذه ، الموضحة سابقا ، والتى لها تطبيقات كثيرة فى الميكانيكا الكوانتية اللانسبية ، تلعب دورا كبيرا الآن فى فيزياء الطاقات العالية ، حيث يمكن تصنيف الحالات المرتبطة وكذلك تصنيف التجاويات لمسارات ريجى ، الخاصة بالجسيمات الأساسية بصورة مستمرة ، بالاضافة إلى استخلاص نتائج جوهرية جدا حول السلوك التقاربى للمقاطع الفعالة لتفاعلات الجسيمات ذات الطاقات العالية .

البند ١٦ ـ الذرة فى حقل مغناطيسى

لنكتب معادلة شرودينجر عند وجود حقلين كهربائى ساكن (الكمون عددى Φ) ومغناطيسى (الكمون شعاعى A) . ولهذا سننطلق من العبارة الكلاسيكية للطاقة

$$E = \frac{P^2}{2m_0} + e\Phi \qquad (16.1)$$

حيث :

$$\boldsymbol{P} = p - \frac{e}{c}\boldsymbol{A} \qquad (16.2)$$

هو الاندفاع الحركى . ولكى ننتقل إلى المعادلة الكوانتية لا بد لنا كالعادة أن نبدل فى المعادلة (16.1) p بالمؤثر

$$p \rightarrow \mathrm{p} = -i\hbar\nabla$$

ثم التأثير بالعبارة الناتجة على التابع الموجى ψ ، انظر أيضا (2.33) ، وبذلك نجد أن :

$$\left[E - \frac{1}{2m_0}\left(\mathrm{p} - \frac{e}{c}A\right)^2 - e\Phi\right]\psi = 0$$

ثم نحسب المقدار :

$$\left(\mathrm{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi = \left(\mathrm{p}^2 - \frac{e}{c}(\mathrm{p}\boldsymbol{A}) - \frac{e}{c}(\boldsymbol{A}\mathrm{p}) + \frac{e^2}{c^2}\boldsymbol{A}^2\right)\psi$$

حيث يحق لنا فى مجال التقريب الخطى اهمال الحدود اللامتناهية فى الصغر من المرتبة الثانية e^2A^2/c^2 ، وبما أن $\mathrm{div}A = 0$ للحقل المغناطيسى لذا فيمكن كتابة :

$$(\mathrm{p}A)\psi = (A\mathrm{p})\psi$$

وعندئذ تكتب معادلة شرودينجر للالكترون فى حالة وجود الحقلين الكهربائى والمغناطيسى بالشكل التالى :

$$\left(E - \frac{p^2}{2m_0} + \frac{e}{m_0 c}(Ap) - e\Phi\right)\psi = 0 \qquad (16.4)$$

أ) **ظاهرة زيمان** . لقد اكتشف زيمان سنة ١٨٩٦ ، أن الخطوط الطيفية للذرات الواقعة فى حقل مغناطيسى تنقسم إلى عدة مركبات ، وقد سميت هذه الظاهرة فيما بعد بظاهرة زيمان ، ومنذ ذلك الحين تلعب ظاهرة زيمان دورا كبيرا فى أبحاث بنية الذرة وبصورة خاصة فى الأبحاث المتعلقة ببنيتها المغناطيسية ولقد تطورت نظرية هذه الظاهرة جنبا إلى جنب مع الاكتشافات التجريبية الجديدة المتعلقة بالانقسام الزيمانى . ولندرس قبل كل شيء ، بواسطة المعادلة (16.4) الانقسام الزيمانى للخطوط الطيفية للذرات الشبيهة بالهيدروجين والموجودة فى حقل مغناطيسى ثابت ومتجانس ويتجه باتجاه المحور z ، فإذا فرضنا فى هذه الحالة أن :

$$e\Phi = -\frac{Ze_0^2}{r}, \quad \mathcal{H}_x = \mathcal{H}_y = 0, \quad \mathcal{H}_z = \mathcal{H}$$
$$A_x = -y\mathcal{H}/2, \quad A_y = x\mathcal{H}/2 \qquad (16.5)$$

فإننا نجد أن :

$$\frac{e}{m_0 c}(Ap) = \frac{e\mathcal{H}}{2m_0 c}\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = -\frac{e_0\mathcal{H}}{2m_0 c}L_z$$

حيث $L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$ مؤثر مسقط عزم الاندفاع على المحور z ، وبتعويض العلاقة الأخيرة فى (16.4) نكتب معادلة شرودينجر للذرة فى حقل مغناطيسى :

$$\left\{\nabla^2 + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - \frac{e_0\mathcal{H}}{2m_0 c}L_z + \frac{Ze_0^2}{r}\right)\right\}\psi = 0 \qquad (16.6)$$

وعندئذ نرى تابعا موجبا يحقق المعادلة السابقة هو من الشكل التالى :

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\,Y_l^m(\vartheta, \varphi) \qquad (16.7)$$

حيث Y_l^m هو التابع الكروى ، انظر (10.67)، و $R_{nl}(r)$ هو القسم القطرى للتابع الذى يصف الذرة الشبيهة بالهيدروجين ، انظر (12.37) . وليس من الصعب التأكد من ذلك إذا اعتبرنا العلاقة $L_z Y_l^m = \hbar m Y_l^m$, التى يمكن بواسطتها ارجاع المعادلة (16.6) إلى الشكل :

$$\left\{ \nabla^2 + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E' + \frac{Ze_0^2}{r}\right)\right\}\psi = 0 \qquad (16.8)$$

حيث

$$E' = E - \hbar\frac{e_0\mathscr{H}}{2m_0c}m \qquad (16.9)$$

وتتطابق المعادلة (16.8) تماما بشكلها الرياضى مع معادلة شرودينجر للذرات الشبيهة بالهيدروجين التى تعطى توابعها الخاصة بالعلاقة (16.7) أما لتعيين القيم الخاصّة فنكتب العلاقة التالية :

$$E'_n = -\frac{\hbar R Z^2}{n^2}$$

ونحسب E_n طاقة الذرة الشبيهة بالهيدروجين المتواجدة فى حقل مغناطيسى

$$E_{nm} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} + \frac{e_0\mathscr{H}\hbar}{2m_0c}m \qquad (16.10)$$

ومنه نجد أن الحقل المغناطيسى يشوش التناظر المركزى لذا فهو بالتالى يفك الانطباق بالعدد الكوانتى المغناطيسى m الذى يتمتع به كل حقل مركزى ، وعند انتقال الالكترون من الحالة الكوانتية n,m إلى الحالة الكوانتية n', m' يجب أن يصدر شعاعا تواتره ω :

$$\omega = \frac{E_{nm} - E_{n'm'}}{\hbar} = \omega_{nn'} + o\,(m - m') \qquad (16.11)$$

حيث o تواتر لارمور

$$o = \frac{e_0\mathscr{H}}{2m_0c} \qquad (16.11a)$$

وهكذا سيضاف إلى التواتر المعروف لطيف الذرة الشبيهة بالهيدروجين ما يلى

$$\omega_{nn'} = RZ^2\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

أى سيضاف الانقسام الزيمانى للخطوط الطيفية ، وإذا تذكرنا قوانين اختيار العدد الكوانتى المغناطيسى ($\Delta m = 0, \pm 1$) (ظاهرة زيمان العددية) ، أى

$$\Delta\omega = o\,\Delta m = 0,\ \pm o$$

وتتطابق النتيجة الأخيرة مع النتيجة المعروفة التى حصل عليها لورنتز والتى تعتبر أن كل خط طيفى لذرة متواجدة فى حقل مغناطيسى لا بد أن ينقسم إلى اثنين أو ثلاثة خطوط طيفية (لا تستطيع المركبة غير المزاحة المتعلقة بالاهتزاز على المحور z أن تظهر) . ومن الملاحظ أن الانقسام الزيمانى العادى للخطوط الطيفية (ثلاثية وثنائية) لا يرى إلا قليلا وخاصة فى الحالات التالية : ١ ـ فى الحقول المغناطيسية القوية (ظاهرة باشين ـ باك) ؛ ٢ ـ عندما يكون المجموع الكلى للمغزل فى الذرة مساويا للصفر (عند الباراهيليوم مثلا حيث يوجد على السحابة الخارجية الكترونان اتجاه مغزلهما متعاكسان) . وعلى العكس من ذلك نجد انقسامًا أكثر تعقيدا (أكثر من ثلاثة خطوط) يسمى بظاهرة زيمان الشاذة المتعلقة بالخواص المغزلية للالكترونات ، وان ما يسمى بالتأثير المغزلى ـ المدارى يؤدى إلى ظهور البنية المضاعفة لطيف الذرة ، وبتطبيق الحقل المغناطيسى تنقسم المركبات المتباينة ، ولن يؤدى هذا الانقسام إلى تشويش البنية المضاعفة إذا كانت طاقته أقل من المسافة بين مركبات السوية المضاعفة . ولهذا ينبغى أن لا يكون الحقل المغناطيسى قويا جدا ، ولا يمكن بناء نظرية ظاهرة زيمان الشاذة إلا على أساس معادلة ديراك . ونستطيع تعليل ظهور الحد الاضافى فى الطاقة عند تطبيق الحقل المغناطيسى ، بقولنا أنه ناتج عن العزم المغناطيسى للذرة الذى يعطى الطاقة الاضافية

$$\Delta E^{\text{magn}} = -(\mu\mathscr{H}) = -\mu_z\mathscr{H} = \frac{e_0\hbar}{2m_0c}\, m\mathscr{H}$$

ومنه نحصل على قيمة العزم المدارى

$$\mu_z = -\mu_0 m \qquad (16.12)$$

حيث μ_0 هو العزم المغناطيسى العادى الذى يسمى بمغناطيون بـور ويساوى

$$\mu_0 = \frac{e_0\hbar}{2m_0c} \simeq 9{,}3 \cdot 10^{-21}\,\text{erg} \cdot \text{gauss}^{-1}$$

ويجب أن تكون العزوم المغناطيسية لكل الذرات ، مضاعفات لمغناطـون بور وإذا لاحظنا أن مسقط العزم الميكانيكى على المحور z هو $L_z = \hbar m$ نحصل على العلاقة بين العزمين (العلاقة الجيرومغناطيسية) أى أن :

$$\frac{\mu_z}{L_z} = -\frac{e_0}{2m_0c} \qquad (16.13)$$

وهى العلاقة المعروفة أيضا من المفاهيم الكلاسيكية .

ب) **مغزل الالكترون** . توضح نظرية شرودينجر وجود العزمين الميكانيكى المدارى والمغناطيسى فقط اللذين ينتجان عن حركة الالكترون المشحون فى الذرة . والعلاقة الأساسية التى تبرز ذلك هى (16.13) لأنها تشير إلى النسبة بين العزمين المغناطيسى والميكانيكى المدارى ، ثم العلاقة (16.12) التى تؤكد أن عدد الاتجاهات الممكنة للحقل وللعزم المغناطيسى بالنسبة للمحور z يجب أن يكون فرديا لأن عدد الحالات المختلفة بالعدد الكوانتى المغناطيسى m يساوى $2l + 1$. ولقد برهنت الاختبارات التجريبية أن نتائج نظرية شرودينجر لا تنطبق مع المعطيات التجريبية التى أدى تحليلها إلى اكتشاف الخواص المغزلية للالكترونات ، وسنوجز فيما يلى نتائج هذه التجارب . لقد اختبر أينشتين ـ دى جاز (١٩١٥) فى تجاربهما العلاقة الجيرومغناطيسية (16.13) التى سنكتبها بالشكل التالى :

$$\frac{\mu_z}{L_z} = -g \frac{e_0}{2m_0 c} \qquad (16.14)$$

أما قيمة معامل لاندى g فتبين أنه لا يساوى الواحد وإنما 2 $(g = 2)$ خلافا لنظرية شرودينجر (والميكانيكا الكلاسيكية أيضا) . أما شتيرن وكيرلاخ فقد بينا عند دراسة حزمة الذرات فى الحالة s حيث ينعدم العزمان المداريان (الميكانيكى والمغناطيسى) طبقا لـ (16.12) أن للحزمة وهى فى الحالة s ، عزمًا مغناطيسيًا مسقطه على اتجاه معين z يمكن أن يأخذ القيمتين

$$\mu_z = \pm \mu \qquad (16.15)$$

وبرهنت نتائج قياسات المقدار μ أنه يساوى مغناطـون بور

$$\mu_0 = \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c} \qquad (16.16)$$

ولفهم واستيعاب نتائج التجربتين الكلاسيكيتين السابقتين افترض أولينبك وغود سميث أن للالكترون عزما ميكانيكا خاصا وبالتالى عزما مغناطيسيا أيضا ، وقد سمى هذا العزم الميكانيكى بمغزل الالكترون وذلك لربطه بدرجة حرية دورانية داخلية ، والنموذج الكلاسيكى للمغزل هو الدوامة الدائرة ، (وتعنى كلمة *to spin* الانكليزية غزل ، لف) ويجب التأكيد هنا على أنه لا توجد أى نظرية كلاسيكية للمغزل . وطبقاً لنظرية أولينبك وغودسميث يساوى العزم الميكانيكى للالكترون $^1/_2\hbar$ أى أن :

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2} \qquad (16.17)$$

وهكذا ينبغى أن لا يساوى العدد الكوانتى الذى يميز مسقط المغزل على المحور z قيما صحيحة وإنما نصف صحيحة $(m_s = \pm 1/2)$. يؤدى الاختلاف المميز للأعداد الكوانتية الصحيحة (المدارية l والمغناطيسية m) عن انصاف الصحيحة (المغزلية m_s) قبل كل شىء إلى اختلاف عدد الحالات الممكنة ، فالأعداد الصحيحة دائما تعطى عددا فرديا من الحالات (عندما $l = 0$ نجد حالة واحدة $m = 0$ وعندما $l = 1$ نجد ثلاث حالات

$m = 0, +1, -1$ وهكذا . . .) . أما الأعداد نصف الصحيحة فتعطى دائما عددا زوجيا من الحالات (مثلا عندما $s = 1/2$ نجد حالتين هما $m_s = +1/2, -1/2$ وعندما $s = 3/2$ نجد أربع وهكذا . . .) ولقد ظهرت فرضية الأعداد الكوانتية نصف الصحيحة قبل أولينبك ، وغودسميث كمحاولة لفهم الانقسام الثنائى لحدود الذرات وحيدة القيمة الاتحادية أى أنها برهنت على وجوب تمييز مغزل الالكترون بأعداد كوانتية نصف صحيحة توافق اتجاهى عزمه المتعاكسين . فإذا اعتبرنا القيمة 2 للمقدار g الذى أثبتته تجارب أينشتين - دى جاز وأخذنا القيمة المقابلة للعزم الميكانيكى من (16.17) نرى أن مسقط العزم المغناطيسى الخاص على المحور z يجب أن يساوى

$$\mu_{sz} = -\frac{e_0}{m_0 c} S_z = \mp \mu_0 \qquad (16.18)$$

لم تؤد فرضية مغزل الالكترون إلى تفسير الخواص المغناطيسية فحسب وإنما أدت أيضا إلى تفسير الانقسام المضاعف للخطوط الطيفية للذرات .

جـ) معادلة باولى . لقد كان باولى أول من اقترح معادلة موجية لانسبية تأخذ بعين الاعتبار العزم المغناطيسى الخاص للالكترون ، ولهذا فقد أضاف إلى الهاملتونيان العادى فى معادلة شرودينجر حدا يتعلق بتأثير العزم المغناطيسى الخاص للالكترون مع الحقل الخارجى $\mathcal{H}$

$$V^P = -(\mu\mathcal{H}) \qquad (16.19)$$

وعندئذ نكتب معادلة شرودينجر الراسخة

$$\{E - H^{Sch} + (\mu\mathcal{H})\}\psi = 0 \qquad (16.20)$$

حيث H^{Sch} مؤثر هاملتون فى معادلة شرودينجر

$$H^{Sch} = \frac{1}{2m_0}\left(p - \frac{e}{c}A\right)^2 + e\Phi \qquad (16.21)$$

ومن الضروری بعدئذ حساب المقادير الملائمة لوصف العزم المغناطيسى الخاص للالكترون . من المعلوم أن ادخال مفهوم المغزل مرتبط باضافة عدد كوانتى رابع يجب أن يختص بالصفات الداخلية للالكترون ، ويمكن للتابع الموجى Ψ للجسيم أن يتبع ثلاثة أعداد كوانتية فقط موافقة لتكميم ثلاثة متحولات فراغية . ولوصف المغزل وتعريف العدد الكوانتى الرابع فرض باولى تابعين موجبين Ψ_1 و Ψ_2 عوضا عن تابع واحد Ψ ، وفى هذه الحالة سيصف التابع الموجى الأول أحد اتجاهات المغزل بينما يصف الثانى الاتجاه الآخر ، أما المعادلة الموجية نفسها فيجب أن تتألف من مجموع معادلتين ، أى أن :

$$\begin{aligned} a_{11}\Psi_1 + a_{12}\Psi_2 = 0 \\ a_{21}\Psi_1 + a_{22}\Psi_2 = 0 \end{aligned} \qquad (16.22)$$

ويشكل معادلة واحدة من النوع المصفوفى :

$$(a)(\Psi) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = 0 \qquad (16.23)$$

وذلك بالاستفادة من قانون جداء مصفوفتين $(c) = (a)(b)$ ، حيث يساوى كل من عناصر المصفوفة الناتجة مجموع جداءات عناصر أسطر المصفوفة الأولى بما يقابلها من عناصر عمود المصفوفة الثانية

$$c_{ik} = \sum_n a_{in} b_{nk} \qquad (16.24)$$

ولقد اقترح باولى اختيار التابع Ψ بشكل مصفوفة مؤلفة من عمود واحد $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$ أما العزم المغناطيسى الخاص للالكترون فيكتب كما يلى :

$$\mu = -\mu_0 \sigma' \qquad (16.25)$$

حيث μ_0 - مغناطيون بور و σ' هى مصفوفات باولى الثلاث من الدرجة الثانية

$$\sigma'_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma'_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma'_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (16.26)$$

وسنرمز لها بـ σ'_i (يرمز بنفس الحرف ولكن بدون الفتحة لمصفوفات ديراك من الدرجة الرابعة) وهى تعبر عن مساقط متجه المغزل على المحاور الاحداثية . ومن السهل باستخدام قواعد جداء مصفوفتين (16.24) التأكد ان مصفوفات باولى تحقق الخواص التالية :

$$\sigma_1'^2 = \sigma_2'^2 = \sigma_3'^2 = I' \qquad (16.27)$$

١) ـ ان مربع كل مصفوفة يساوى الواحد

$$\sigma_1'^2 = \sigma_2'^2 = \sigma_3'^2 = I' \qquad (16.27)$$

٢) ـ ان المصفوفات المختلفة لا تتبادل مع بعضها وهى تحقق ما يلى :

$$\begin{aligned} \sigma_1'\sigma_2' &= -\sigma_2'\sigma_1' = i\sigma_3' \\ \sigma_2'\sigma_3' &= -\sigma_3'\sigma_2' = i\sigma_1' \\ \sigma_3'\sigma_1' &= -\sigma_1'\sigma_3' = i\sigma_2' \end{aligned} \qquad (16.28)$$

فإذا بدلنا قيم هذه المصفوفات فى معادلة باولى نجد أنها تتحول إلى الشكل

$$\left\{ (E - H^{Sch}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \mu_0 \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mathcal{H}_x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \mathcal{H}_y + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \mathcal{H}_z \right] \right\} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = 0 \qquad (16.29)$$

وهى مكافئة لمجموعة المعادلتين :

$$\begin{aligned} (E - H^{Sch} - \mu_0 \mathcal{H}_z)\Psi_1 - \mu_0(\mathcal{H}_x - i\mathcal{H}_y)\Psi_2 &= 0 \\ (E - H^{Sch} + \mu_0 \mathcal{H}_z)\Psi_2 - \mu_0(\mathcal{H}_x + i\mathcal{H}_y)\Psi_1 &= 0 \end{aligned} \qquad (16.30)$$

ولندرس بصورة خاصة حركة الكترون فى حقل مغناطيسى يتجه باتجاه z $(\mathcal{H}_x = \mathcal{H}_y = 0, \mathcal{H}_z = \mathcal{H})$ فإذا اعتبرنا أن (16.8) هو مؤثر هاملتون فى معادلة شرودينجر عندما يتواجد الحقل المغناطيسى ، فنجد لوصف الالكترون المعادلتين التاليتين :

$$\begin{aligned} \left\{ E + e_0\Phi - \mu_0\mathcal{H}m - \mu_0\mathcal{H} - \frac{p^2}{2m_0} \right\} \Psi_1 &= 0 \\ \left\{ E + e_0\Phi - \mu_0\mathcal{H}m + \mu_0\mathcal{H} - \frac{p^2}{2m_0} \right\} \Psi_2 &= 0 \end{aligned} \qquad (16.31)$$

حيث يصف الحدان $\mu_0 \mathcal{H} m$ و $\pm \mu_0 \mathcal{H}$ تأثير العزمين المدارى والمغزلى على الترتيب مع الحقل المغناطيسى $\mathcal{H}$. وبصورة خاصة ينعدم العدد الكوانتى المغناطيسى m فى الحالة s ولهذا تكتب معادلة باولى بالشكل التالى :

$$\left(E + e_0\Phi - \mu_0\mathcal{H} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0}\right)\Psi_1 = 0$$
$$\left(E + e_0\Phi + \mu_0\mathcal{H} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0}\right)\Psi_2 = 0 \qquad (16.32)$$

أى أن التابع الموجى Ψ_1 يصف الحالة حيث يتجه العزم الميكانيكى الخاص للالكترون باتجاه z أما Ψ_2 فيصف الحالة المعاكسة . وهذان الاتجاهان المحتملان للعزم المغناطيسى الخاص هما ما ظهرا فى فى تجارب شتيرن وكيرلاخ ، وقد اقترح باولى اختيار التابع Ψ^+ ، وهو ما يسمى بتابع هيرميت الموجى المقترن ، بشكل مصفوفة $\Psi^+ = (\Psi_1^*, \Psi_2^*)$ عناصرها مقترنة ومنتقلة وبعبارة أخرى يمكن تبديل الأسطر بالأعمدة ، فإن Ψ^+ سيكون مصفوفة سطر عناصرها مقترنة عقديا بعناصر المصفوفة Ψ ، وعندئذ نحصل على عبارة الكثافة الاحتمالية التالية :

$$\Psi^+\Psi = (\Psi_1^*\Psi_2^*)\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} = \Psi_1^*\Psi_1 + \Psi_2^*\Psi_2 \qquad (16.33)$$

التى تأخذ بعين الاعتبار اتجاهى المغزل ، وبنفس الطريقة يجب أن نحصل على العناصر المصفوفية ، فمثلا :

$$\Psi^+\sigma_3'\Psi = (\Psi_1^*\Psi_2^*)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} = \Psi_1^*\Psi_1 - \Psi_2^*\Psi_2 \qquad (16.34)$$

أى أن $\Psi_1^*\Psi_1$ ، $\Psi_2^*\Psi_2$ يصفان احتمال الحالات التى يمكن لمغـزل الالكترون أن يتجه باتجاه أو بعكس اتجاه z على الترتيب ، فإذا علمنا طبقا لنظرية باولى عبارة العزم المغناطيسى الخاص ، أى أن :

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e_0 h}{2m_0 c}\sigma'$$

وكذلك العلاقة بين العزمين المغناطيسى والميكانيكى التى تنتج من تجربة اينشتين - دى جاز

$$\mu = -\frac{e_0}{m_0 c} S$$

فإننا نجد :

$$S = \frac{1}{2} \hbar \sigma' \qquad (16.35)$$

أى يتوافق مع الحقائق التجريبية الأخرى التى تبين أن مسقط المغزل على z يساوى $\pm\hbar/2$ ، وبما أنه يعبر عن مؤثر المغزل بدلالة مصفوفات باولى فلا يجوز أن تتبادل مركباته ، وطبقا للمعادلتين (16.28) و (16.35) ، نستطيع كتابة العلاقات :

$$\begin{aligned} S_x S_y - S_y S_x &= i\hbar S_z \\ S_y S_z - S_z S_y &= i\hbar S_x \\ S_z S_x - S_x S_z &= i\hbar S_y \end{aligned} \qquad (16.36)$$

مع ملاحظة أن ثمة علاقات تبادلية مشابهة كانت قد استنتجت لمركبات العزم المدارى ، انظر (10.75) و (10.76) ، التى هى مؤثرات مؤلفة من مشتقات . ولنلاحظ أيضا أن القيم المطلقة للعزمين المغناطيسى والميكانيكى قد أدخلت تجريبيا فى نظرية باولى .

د) **فصل التوابع المغزلية عن الاحداثية** . لندرس حركة الكترون فى حقل مغناطيسى متجانس $\mathcal{H}$ ، وسنبرهن أن حل معادلة باولى فى هذه الحالة ستتفكك إلى جداء القسمين الاحداثى والمغزلى ، ولهذا نبحث عن الحل بالشكل التالى :

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(r, t) \\ \Psi_2(r, t) \end{pmatrix} = \psi(r, t) \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix} \qquad (16.37)$$

وعندئذ من السهل أن نبرهن أن القسم الاحداثى من التابع الموجى $\psi(r, t)$ يحقق معادلة شرودينجر العادية التى لا تهمل المغزل

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = H^{Sch} \psi(r, t) \tag{16.38}$$

أما القسم المغزلى فيمكن أن يحسب من المعادلة الآتية :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix} = \mu_0 (\sigma' \mathscr{H}) \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix} \tag{16.39}$$

أما معايرة التوابع المغزلية فتتم بالشكل :

$$(C_1^* C_2^*) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = C_1^* C_1 + C_2^* C_2 = 1 , \tag{16.40}$$

وعندما يكون الحقل المغناطيسى ثابتا فيمكن حساب المركبة الزمنية فى المعادلات الأخيرة أيضا ولهذا نجعل :

$$\begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{\hbar} E_s t} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \tag{16.41}$$

$$\psi(r, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E - E_s) t} \psi(r) \tag{16.42}$$

وعندئذ لحساب الأقسام من التابع الموجى غير المتعلقة بالزمن وكذلك لحساب E_s نحصل المعادلتين التاليتين :

$$(E - E_s) \psi = H^{Sch} \psi \tag{16.43}$$

$$E_s \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \mu_0 (\sigma' \mathscr{H}) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \tag{16.44}$$

ثم نحسب القيم الخاصة لمسقط العزم المغزلى إذا اعتبرنا أن z موجه باتجاه الحقل وعندئذ تصبح المعادلة الأساسية :

$$S_z \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \hbar\lambda \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \tag{16.45}$$

حيث

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{16.46}$$

وتكافىء المعادلة المصفوفية (16.45) مجموعة معادلتين جبريتين متجانستين هما :

$$\frac{1}{2}C_1 - \lambda C_1 = 0$$
$$\frac{1}{2}C_2 + \lambda C_2 = 0 \qquad (16.47)$$

والحلول المعايرة لهذه المعادلات هى :

$$\lambda = \frac{1}{2}, \quad C\left(\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \lambda = -\frac{1}{2}, \quad C\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (16.48)$$

ومن الواضح أن الحل الأول يوافق الحالة عندما يتجه المغزل باتجاه z والثانى عندما يتجه المغزل بعكس اتجاه z ، وطبقا لـ (16.44) تساوى طاقة كل من الحالتين :

$$E_s = \mu_0 \mathscr{H} \quad , \quad \lambda = \frac{1}{2} \quad , \quad E_s = -\mu_0 \mathscr{H} \quad , \quad \lambda = -\frac{1}{2} \qquad (16.49)$$

هـ) **الالكترون فى الحقل المغناطيسى** . لنفرض أن الحقل الكهربائى يساوى الصفر $\Phi = 0$ ويوجد حقل مغناطيسى متجانس $\mathscr{H}$ ، وفى هذه الحالة يمكن حل معادلة شرودينجر بصورة دقيقة كما فى مسألة كبلر . وعندئذ يتعين القسم المغزلى من التابع الموجى والطاقة المقابلة له طبقا للعلاقتين (16.48) و (16.49) اللتين حصلنا عليهما فى الفقرة (د) ، ولندرس المعادلة (16.3) حيث سنجعل $\Phi = 0$ وسنأخذ فيها الحدود من المرتبة الثانية للكمون المتجه A بالاضافة إلى الحدود الخطية ، وعندئذ نجد بواسطة العلاقات (16.5) التى يجب أن نضع فيها $Z = 0$ لطاقة الكمون ، أن :

$$\left\{ \frac{p^2}{2m_0} + \frac{e_0^2 \mathscr{H}^2}{8m_0c^2}(x^2 + y^2) + \frac{e_0 \mathscr{H}}{2m_0c} L_z \right\} \psi = E\psi \qquad (16.50)$$

وينبغى البحث عن حل لهذه المعادلة ، التى وضع فيها الكمون المتجه بالشكل المتاظر (16.5) ، فى الاحداثيات الاسطوانية r, φ, z التى ترتبط بالاحداثيات الديكارتية x, y, z بالعلاقات

$$x = r\cos\varphi, \quad y = r\sin\varphi, \quad z = z \qquad (16.51)$$

وهكذا يكون

$$r^2 = x^2 + y^2 \qquad (16.52)$$

فإذا لاحظنا العبارة العامة للابلاسيان فى الاحداثيات المنحنية (10.14) فيمكن كتابة (16.50) بواسطة (16.51) بالاحداثيات الاسطوانية الشكل :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \gamma^2 r^2 + 2i\gamma\frac{\partial}{\partial \varphi}\right]\psi = E\psi \qquad (16.53)$$

حيث : $\gamma = e_0\mathscr{H}/2\hbar c$ ونبحث عن حل المعادلة الأخيرة بشكل يراعى فصل المتحولات :

$$\psi = \frac{e^{il\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\,\frac{e^{ik z}}{\sqrt{L}}\,R(r) \qquad (16.54)$$

حيث l هو عدد كوانتى سمتى يأخذ القيم ... $l = 0, \pm 1, \pm 2,$ و k_3 هو مسقط العدد الموجى على z ، وعندئذ نحصل لحساب القسم القطرى $R(r)$ على المعادلة التالية :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l^2}{r^2} - 2\gamma l - \gamma^2 r^2 + \frac{2m_0E}{\hbar^2} - k_3^2\right) R = 0 \qquad (16.55)$$

التى يمكن ردها إلى شكل أبسط إذا استعملنا المتحول العددى $\rho = \gamma r^2$ حيث نجد أن :

$$\left(\rho\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{d}{d\rho} + \lambda - \frac{l}{2} - \frac{\rho}{4} - \frac{l^2}{4\rho}\right) R = 0 \qquad (16.56)$$

حيث :

$$\lambda = \frac{2m_0E - \hbar^2 k_3^2}{4\gamma\hbar^2} \qquad (16.57)$$

وسنعتبر فى البدء أن العدد المدارى $l \geqslant 0$، وعندئذ يمكن التعبير عن حل

المعادلة (16.56) باعتبار السلوك التقاربى للتابع القطرى بالشكل التالى :

$$R \sim e^{-\rho/2} \quad (\rho \to \infty), \quad R \sim \rho^{l/2} \quad (\rho \to 0) \qquad (16.58)$$

أى يمكن التعبير عنه من خلال تابع لاجير المعطى فى البند ١٣ ، انظر (13.24) ، وهكذا نكتب حل (16.56) المحدود بين الصفر واللانهاية كما يلى :

$$R_{ns}(\rho) = \text{const}\, I_{ns}(\rho) \qquad (16.59)$$

حيث يساوى تابع لاجير :

$$I_{ns}(\rho) = \frac{1}{\sqrt{n!s!}} e^{-\rho/2} \rho^{\frac{n-s}{2}} Q_s^{n-s}(\rho) \qquad (16.60)$$

وحيث Q_s^{n-s} هو كثير حدود لاجير ، انظر (12.36) . فيما يتميز الحل (16.59) بالاعداد القطرية الكوانتية ... ,$s = 0, 1, 2$ التى تعطى درجة كثير الحدود Q_s^{n-s} . ولكى يكون التابع الباقى بعد عزل الحل التقاربى (16.58) كثير حدود ، كما رأينا فى البند ١٣ ، ينبغى أن ترتبط معاملات المعادلة (16.56) بـ s بالعلاقة التالية :

$$\lambda - \frac{l}{2} - \frac{l+1}{2} = s \qquad (16.61)$$

أى أن $\lambda = l + s + \frac{1}{2} = n + \frac{1}{2}$ حيث ... ,$n = l, l+1, l+2$ هو العدد الكوانتى الرئيسى ، وإذا بدلنا هنا قيمة λ من (16.57) نجد لحساب الطاقة المعادلة التالية :

$$\frac{2m_0 E - \hbar^2 k_3^2}{4\gamma\hbar^2} = n + \frac{1}{2} \qquad (16.62)$$

ومنه نجد طيف طاقة الالكترون المتحرك فى حقل مغناطيسى :

$$E = \hbar\Omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_0} \qquad (16.63)$$

حيث $\Omega = e_0\mathcal{H}/m_0 c$ - التواتر الدورى و $\hbar k_3$ هى القيمة (المستمرة) لمسقط الاندفاع على المحور z الموجه باتجاه الحقل ($-\infty < k_3 < \infty$) هذاويمثل الحد الأول فى المجموع (16.63) أى الحد

$$E_\perp = \hbar\Omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (16.64)$$

طاقة الحركة العرضانية التى تبدو مكممة خلافا لطاقة الحركة الطولانية $h^2k^2_3 / 2m_0$ وهكذا نحصل على سويات منقطعة (لانداو ١٩٣٠) تعطى بواسطة الأعداد الكوانتية الرئيسية n (معادلة لانداو) ويكتب الحل العام المعاير على الواحد لمعادلة شرودينجر للالكترون فى حقل مغناطيسى بعد دمج المساواتين (16.54) و (16.59) وبفرض : $\text{const} = \sqrt{2\gamma}$ بالشكل التالى :

$$\psi_{nsk_3} = \frac{e^{il\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{ik_3 z}}{\sqrt{L}} \sqrt{2\gamma}\, I_{ns}(\gamma r^2) \qquad (16.65)$$

ومن هنا نلاحظ انطباق طيف الطاقة (16.63) لأنه لا يتعلق بالعدد الكوانتى القطرى s ويسهل فهم معنى الأعداد الكوانتية s, n عند الانتقال إلى الحالة الكلاسيكية ، ولهذا تكتب العلاقة الكلاسيكية بين متجه موضع المتحرك الذى تكتب سرعته عندما تتم الحركة فى الحقل المغناطيسى بفرض غياب الحركة الطولية ($k_3 = 0$)

$$\frac{-m_0 v^2}{R} = \frac{e_0}{c}\mathcal{H} v \qquad (16.66)$$

ومن هنا نجد عبارة الطاقة

$$E_{\perp} = \frac{m_0 v^2}{2} = \frac{(e_0 \mathcal{H} R)^2}{2 m_0 c^2}$$

وبمقارنتها مع العلاقة الكمية (16.64) نجد أن :

$$R = \sqrt{\frac{n + \frac{1}{2}}{\gamma}} \qquad (16.67)$$

ولنحسب الآن المتوسط التربيعى لبعد الالكترون عن مركز الاحداثيات فى الحالة ψ_{nsk_z}

$$\langle r^2 \rangle = \int \psi^*_{nsk_z} r^2 \psi_{nsk_z} d^3x = \frac{n+s+1}{\gamma} \qquad (16.68)$$

ومن الضرورى لاستنتاج هذه المساواة استخدام علاقة تابع لاجير التالية :

$$x I_{ns} = (n+s) I_{ns} - 2 \left(x I'_{ns} + \sqrt{ns}\, I_{n-1,\, s-1} \right)$$

ثم اعتبار شرط المعايرة والتعامد (13.38) . ويمكن تفسير النتيجة (16.68) بالشكل التالى : لنفرض أن الحركة الكلاسيكية تحدث على مسار مرئى دائرى نصف قطره R يبعد مركزه a عن مركز الاحداثيات ويقع على المحور x ، وعندئذ ستكون معادلة مسار الالكترون :

$$r^2 = R^2 + a^2 + 2aR\cos\varphi \qquad (16.69)$$

ومتوسط مربع r فى هذه الحالة الكلاسيكية سيكون :

$$\overline{r^2} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \,(R^2 + a^2 + 2aR\cos\varphi)\, d\varphi = R^2 + a^2 \qquad (16.70)$$

لنلاحظ الآن أن التابع ψ'_{nsk_s} يصف حالة الالكترون المتناظرة بالنسبة للمحور x المار من مبدأ الاحداثيات ، ولهذا السبب نستطيع بمقارنة العلاقتين الكلاسيكية (16.70) مع الكوانتية (16.68) أن نستخلص أن العدد الكوانتى s يرتبط مع متوسط مربع البعد a بين مركز الاحداثيات ومركز المسارات الدائرية المتناظرة بالنسبة للمحور z والموافقة للحركة الكلاسيكية ، أى أن :

$$a^2 = \frac{s + 1/2}{\gamma} \qquad (16.71)$$

ونلاحظ أنه عندما $l = n - s > 0$ يكون مركز الاحداثيات داخل المدارات الدائرية ($R > a$) وعندما $l = n - s < 0$ فإن المركز يقع خارجها ($R < a$) . ويمكن دراسة الحالات التى تكون فيها l سالبة ... $l = -1, -2, -3,$ أيضا بواسطة المعادلة (16.65) إذا اعتبرنا العلاقة التى يحققها كثير حدود لاجير هى التالية :

$$Q_s^l(\rho) = (-1)^l \rho^{|l|} Q_{s-|l|}^{|l|}(\rho) \qquad (16.72)$$

ومن الضرورى فى هذه الحالة أن يكون الوسيط الأدنىأى درجة Q^{-l}_{s+l} موجبة : $s + l = s - |l| > 0$ ومن هنا ينتج أنه عندما $l < 0$ سيتغير مجال الأعداد الكوانتية n, s بالمقارنة مع الحالة $l > 0$ وسيكتب بالشكل التالى :

$$n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots;\quad s = |l|,\ |l| + 1,\ |l| + 2,\ \ldots \qquad (16.73)$$

وعندئذ تتعين سويات الطاقة كما سبق بالمعادلة (16.64) ، أى أنها تتبع العدد الكوانتى الرئيسى n . ونلاحظ أيضا أن العدد الكوانتى l يمثل القيم الخاصة لمؤثر مسقط العزم الحركى القانونى $L_z = [r\mathrm{p}]_z$ المرتبط مع الاندفاع القانونى p . ويختلف هذا عن العزم الحركى المرتبط بالاندفاع

$\mathrm{P} = \mathrm{p} + \frac{e_0}{c} A$. وفي حالة وجود الحقل المغناطيسي (الكمون المتجه $A \neq 0$) ولهذا فإن دوران الالكترون يحافظ على اتجاهه الموجب ، كما هو متوقع ، مهما كانت اشارة l . وتساعد المسألة المدروسة في هذا البند على فهم الخواص المغناطيسية للمعادن .

ويجب أن تعطى الكترونات الناقلية (الموصلية) ، التى تعتبر حرة تقريبا حسب التصورات الحديثة ، القسط الأساسى فى تمغنط المعدن ، فعند اعتبار التأثيرات المغزلية من الضرورى اضافة العزم المغناطيسى الخارجى الذى يمكن أن يتجه باتجاه أو بعكس اتجاه الحقل المغناطيسى المطبق ، انظر (16.49) ، ومن المناسب أكثر من وجهة نظر الطاقة تصور التوجيه باتجاه الحقل لأن هذا يؤدى إلى زيادة قابلية المعدن للتمغنط ، وهكذا فإن القابلية المذكورة ترتبط بالعزم المغناطيسى الخاص لالكترونات المعدن أو أن القابلية المغناطيسية المسايرة تكون ايجابية (باولى ١٩٢٧) . أما تكميم الحركة المدارية لالكترونات المعادن الحرة فى حقل مغناطيسى فقد أدى إلى ظهور عزم مغناطيسى كلى بعكس اتجاه الحقل وبالتالى فالقابلية المغناطيسية المعاكسة للمعدن تتميز عن القابلية المغناطيسية (تمغنط لانداو المعاكسى ١٩٣٠) . وتتعلق القابلية المغناطيسية أخيرا بدرجة الحرارة وشدة الحقل المغناطيسى المطبق ، فعند درجات الحرارة العالية نسبيا T وحقول مغناطيسية ضعيفة ($\mathcal{H}\ \hbar\Omega = \hbar e_0 \mathcal{H}/m_0 c \ll k_B T$ ، حيث k_B ثابت بولسمان) ويكون للتمغنط الالكترونى قابلية موجبة أى أن مغناطيسية المسايرة تفوق مغناطيسية المعاكسة ، وعند زيادة شدة الحقل وخاصة عندما $\hbar\Omega \gtrsim k_B T$ يأخذ متوسط العزم المغناطيسى للتمغنط الالكترونى سلوكا تذبذبيا .

و) **ذرة الهيدروجين فى حقل مغناطيسى قوى** . يؤدى تطبيق الحقل المغناطيسى الضعيف نسبيا ، على الذرة إلى انقسام سويات الطاقة فيها أى

إلى ظاهرة زيمان المدروسة سابقا ، وعندئذ لا يتغير شكل الذرة نفسها .
ولنفرض الآن أن الذرة تقع فى حقل مغناطيسى قوى جدا بحيث تتحدد حركة الالكترون فى مستو معامد لاتجاه الحقل ، بصورة رئيسية بالحقل المغناطيسى لا بالحقل الكولونى للنواة ، ولهذا تتشوه الذرة بالاتجاه العرضانى ، بينما لا تتأثر الحركة بالاتجاه الطولانى كما لا تتأثر أبعاد الذرة فى هذا الاتجاه . ومن السهل حساب الحقل المغناطيسى الذى يبدأ عنده تشوه السحابة الالكترونية ، ولهذا من الضرورى مقارنة نصف قطر مدار بور $a_0 = \hbar^2/m_0e^2$ مع البعد المميز لتوضع الالكترونات ، فى الحقل وهى فى الحالة الأساسية $n = 0, s = 0$ الذى نحصل عليها من (16.67) ، أى مع المقدار $a_{\mathscr{H}} = 1/\sqrt{2\gamma} = \sqrt{\hbar c/e_0\mathscr{H}}$ فإذا كانت $a_{\mathscr{H}} < a_0$ فإن للحقل المغناطيسى تأثيرا محدودا يؤدى إلى تعميم مفعول أقوى حقل مغناطيسى تتشوه عنده الذرة ، أى أن :

$$\mathscr{H} > \frac{m_0^2ce_0^3}{\hbar^3} = \mathscr{H}_{\text{kr}} = 2{,}35 \cdot 10^9 \text{ gauss}^{-1} \qquad (16.74)$$

ولندرس بالتفصيل مسألة الذرة فى حقل مغناطيسى قوى ولنكتب قبل كل شىء معادلة شرودينجر لالكترون بوجود حقلين مغناطيسى متجانس وكولونى ، وهنا من الأسهل استخدام الاحداثيات الاسطوانية r, φ, z وستختلف المعادلة الناتجة عن المعادلة (16.53) بحد واحد هو الكمون $V = -e_0^2/\sqrt{r^2+z^2}$ (حيث أن الشحنة $Z = 1$) ، أى أن :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \gamma^2r^2 + 2i\gamma\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\psi - \frac{e_0^2}{\sqrt{r^2+z^2}}\psi = E\psi \qquad (16.75)$$

ولا يمكن فصل المتحولات فى هذه المعادلة بسبب وجود الحد الكولونى ،

إلا أنه من الممكن بتحقيق الشرط (16.74) ، أى أن نجد حلا تقريبيا (16.75) لها إذا اعتبرنا وجوب تعيين الحركة العرضانية من الحقل المغناطيسى فقط . ولندرس الحالة الأساسية فى الحقل المغناطيسى $n = 0$ عندما $s = 0, l = 0$ ، وعندئذ يمكن البحث عن الحل بالشكل الآتى :

$$\psi(r, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} I_{00}(\rho)\chi(z) \qquad (16.76)$$

حيث I_{00} هو التابع المتعلق بالمتحول القطرى $\rho = \gamma r^2$ ويساوى طبقا لـ (16.29) إلى

$$I_{00}(\rho) = e^{-\rho/2} \qquad (16.77)$$

أما التابع $\chi(z)$ المتعلق بـ z فهو قيد التعيين ، ولنبدل (16.76) فى (16.75) مع اعتبار أن (16.77) يحقق (16.56) بقيمة خاصة $\lambda = {}^1/_2$ وعندئذ نحصل على المعادلة التالية :

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - \frac{\hbar\Omega}{2}\right) + \frac{2m_0}{\hbar^2}\frac{e_0^2}{\sqrt{r^2 + z^2}}\right]\chi(z)\,\frac{e^{-\rho/2}}{\sqrt{2\pi}} = 0 \qquad (16.78)$$

ولنضرب هذه المعادلة $e^{-\rho/2}/\sqrt{2\pi}$ ولنأخذ التكامل فى المستوى xy بالاحداثيات r, φ . وبما أن التكامل بالمتحول φ يساوى 2π وأن الحد الأخير فقط ضمن الفرض (16.78) هو ما يتعلق بـ r فإننا نجد النتيجة التالية :

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dz^2} + E - \frac{\hbar\Omega}{2} + e_0^2\sqrt{\gamma}\int_0^\infty \frac{d\rho\, e^{-\rho}}{\sqrt{\rho + \gamma z^2}}\right]\chi(z) = 0 \qquad (16.79)$$

ولندرس أيضا حالات الذرة التى تتحدد فيها أبعادها على طول z بالحد الكولونى أى أن $\langle z^2 \rangle \sim a_0^2$*، وطبقا لهذا الشرط يكون $a_{\text{æ}} \gg a_0$ وهذا يعنى $\langle z^2 \rangle \gg a_{\text{æ}}^2$ أو $\gamma \langle z^2 \rangle \gg 1$ وهكذا نستطيع اهمال المقدار ρ تحت الجذر فى العبارة المستكملة وهذا ما يعطى :

$$\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\chi}{dz^2} + \frac{e_0^2}{|z|}\chi + \left(E - \frac{\hbar\Omega}{2}\right)\chi = 0 \qquad (16.80)$$

وهى معادلة شرودينجر فى الحقل الكولونى المتجانس $e_0^2/|z|$: وبتعويض المقدار $\chi = z\varphi(z)$ تتحول المعادلة إلى الشكل العيا رى

$$\frac{d^2\varphi}{dz^2} + \frac{2}{z}\frac{d\varphi}{dz} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - \frac{\hbar\Omega}{2} + \frac{e_0^2}{|z|}\right)\varphi = 0 \qquad (16.81)$$

وهى نفس المعادلة التى يحققها القسم القطرى فى مسألة كبلر (12.4) للحالة $l = 0$ أما الطيفُ المقابل فمعلوم وهو يعطى بالعلاقة (12.18) أى أنه يساوى فى حالتنا هذه إلى :

$$E - \frac{\hbar\Omega}{2} = -\frac{m_0 e_0^4}{2\hbar^2 n_z^2} \qquad (16.82)$$

حيث $n_z = 1, 2, 3, \ldots$. أما الحل $\varphi(z)$ فمعلوم أيضا ويعبر عنه بالعلاقة (12.40) عندما $l = 0$ ، والصيغة المميزة لهذه الحلول هى انخفاضها الأسى

---

* نلاحظ أنه بالاضافة إلى الحالات المشار إليها يمكن أن تتواجد حالة أخرى (أساسية) تابعها الموجى يختلف عن الصفر عندما $|z| \lesssim a_0$. لكننا سنهمل هذه الحالة هنا .

عندما $z > a_0$ ، وفى الحالة $n_z = 1$ نحصل على الحد التالى :

$$\chi_1 = Cze^{-z/a_0} \quad (16.83)$$

بينما يسلك التابع الموجى فى الاتجاه العرضانى سلوكا أسيا وفقا لـ (16.77) كالتابع $\exp(-\rho/2) = \exp(-r^2/4a_{\varkappa}^2)$ أى أنه يتخامد على مسافات أكثر قربا من مركز الاحداثيات أى عندما $r \sim a_{\varkappa} \ll a_0$ ، وهكذا نرى أن الحقل المغناطيسى القوى جدا يشوه الذرة بالاتجاه العرضانى مما يعطيها شكلا أهليلجيا (بيضويا) . ولنلاحظ أنه لحدوث ذلك لا بد أن تتوفر حقول مغناطيسية تحدد شدتها بالعلاقة (16.74) ويمكن أن يتحقق ذلك ، طبقا للتصورات الحديثة ، على سطوح بعض الأجرام الفلكية وتعتبر النجوم النترونية من هذا الصنف وهى تحدث نتيجة الضغط على سطوح النجوم المشتطة الجديدة ولهذا فإن متابعة دراسة بنية المادة ، ضمن مفهوم الحقول المغناطيسية القوية جدا، تلقى اهتماما كبيرا .

القسم الثانى

الميكانيكا الكوانتية النسبية

البند ١٧ ـ معادلة كلين ـ جوردون الموجية النسبية العددية

أ) الميكانيكا الكلاسيكية النسبية ومعادلة كلين ـ جوردون . تطبق معادلة شرودينجر التى درسناها سابقا باسهاب على دراسة حركة الجسيمات التى سرعتها أقل بكثير من سرعة الضوء c لكنها تتغير عندما نطبق عليها تحويلات النظرية النسبية الخاصة (تحويلات لونتز) لأن الزمن والاحداثيات لا تدخل فيها بشكل متشابه فهى تحوى على مشتقات من الدرجة الأولى بالنسبة للزمن وعلى مشتقات من المرتبة الثانية بالنسبة للاحداثيات فى الوقت الذى تحتاج فيه النظرية النسبية إلى شكل متجانس بالنسبة للاحداثيات والزمن . وللحصول على المعادلة الموجية النسبية سننطلق من العلاقة الكلاسيكية النسبية بين الكتلة والطاقة التى نكتبها أولا للجسيمات الحرة ، أى أن :

$$E=\sqrt{c^2p^2+m_0^2c^4} \qquad (17.1)$$

وبعدئذ سنستخدم نفس الأسلوب الذى استخدمناه أثناء الحصول على المعادلة اللانسبية أى بتبديل كل من الطاقة وكمية الحركة بالمؤثرين :

$$E\rightarrow \mathrm{E}=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t},\quad p\rightarrow \mathrm{p}=\frac{\hbar}{i}\nabla \qquad (17.2)$$

إلا أنه من غير الواضح كيف سيؤثر المؤثر الموجود تحت الجذر على التابع الموجى .. ولهذا عند الانتقال من المعادلة الكلاسيكية إلى الموجية يجب أولا التخلص من الجذر التربيعى ويجوز ذلك بطريقتين : أما أن نربع الطرفين ونحصل على معادلة كليف ـ جوردن العددية أو أن تستخرج الجذر بواسطة المصفوفات ونحصل على معادلة ديراك المغزلية التى تأخذ بعين الاعتبار التأثيرات المغزلية بالاضافة إلى التأثيرات النسبية (التى تظهر فى معادلة كلين ـ جوردون) . وسندرس فى هذا البند الأسلوب الأول الذى طوره العالم فوك ، فنربع طرفى المعادلة (17.1) حيث نجد أن

$$E^2 - c^2p^2 - m_0^2c^4 = 0 \qquad (17.3)$$

فإذا عوضنا المؤثرين بقيمتهما من (17.2) نحصل على معادلة كلين ـ جوردون للجسيم الحر التالية* :

$$\left(c^2\hbar^2\nabla^2 - \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2} - m_0^2c^4\right)\psi = 0 \qquad (17.4)$$

وعند وجود حقل كهرطيسى لا بد من استخدام المؤثرين المعممين التاليين** :

$$E \to \mathrm{F} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi$$

$$p \to \mathbf{P} = \frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}A \qquad (17.5)$$

وعندئذ نحصل على المعادلة النسبية التى تطبق عند وجود الحقل ، أى أن :

$$\left[\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi\right)^2 - c^2\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}A\right)^2 - m_0^2c^4\right]\psi = 0 \qquad (17.6)$$

---

* ان التابع الموجى ψ فى (17.4) يتبع الاحداثيات r والزمن t ، وعلى كل حال يمكن للقارىء أن يدرك بسهولة فيما إذا كان التابع الموجى يتعلق بالزمن (مثلا عندما تحوى المعادلة على مشتقات بالنسبة للزمن) ولهذا لن نشير إلى تبعية الزمن إلا فى الحالة التى لا تكون التبعية فيها واضحة تماما .

** عند وجود الحقل فى الحالة الكلاسيكية نحصل على العلاقات التالية :

$$E = \sqrt{c^2P^2 + m_0^2c^4} + e\Phi \qquad F = \sqrt{c^2P^2 + m_0^2c^4}$$

وهو ما يتلاءم مع المؤثرين (17.5)

ان المعادلة (17.6) والمعادلة الكلاسيكية (17.1) ، خلافا لمعادلة شرودينجر ، هما معادلتان لا تتغيران بالنسبة لتحويلات لونتز لأن الزمن والاحداثيات تدخل فيها بشكل متشابه وعلى نفس الأسس ، ويمكن أن نكتب المساواة (17.6) فى الحالة النسبية بالشكل الأعم التالى :

$$(P_t^2 - P^2 - m_0^2c^2)\,\psi = 0$$

حيث

$$P_t = \frac{F}{c}$$

ب) **كثافة الشحنة وكثافة التيار** . سنحسب كثافة الشحنة وكثافة التيار بغياب الحقل الكهرطيسى ($\Phi = A = 0$) ولا بد كذلك ، كما هو الحال فى نظرية شرودينجر من كتابة معادلة الاستمرارية التالية :

$$\operatorname{div} j + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \qquad (17.7)$$

وهى كما نعلم معادلة معممة نسبيا . ولنضرب المعادلة (17.4) من اليسار بـ ψ^* وكذلك المعادلة المرافقة لها عقديا التى نحصل عليها من (17.4) بتبديل ψ بـ ψ^* وبعد أن نطرحهما طرفا من طرف نجد المعادلة

$$\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^* - \frac{1}{c^2}\left(\psi^*\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi - \psi\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi^*\right) = 0 \qquad (17.8)$$

التى يمكن تحويلها إلى الشكل التالى :

$$\operatorname{div}\{\psi \operatorname{grad}\psi^* - \psi^* \operatorname{grad}\psi\} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\left\{\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right\} = 0 \qquad (17.9)$$

وإذا عرفّنا كثافة الشحنة وكثافة التيار على الترتيب بالعلاقتين :

$$\rho = \frac{ie\hbar}{2m_0c^2}\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)\psi\right] \qquad (17.10)$$

$$j = \frac{e\hbar}{2im_0}\left[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\,\psi\right] \qquad (17.11)$$

فإننا نلاحظ أنهما تحققان معادلة الاستمرارية (17.7) بالاضافة إلى أنهما تؤلفان متجها فى الفراغ الرباعى هو :

$$j_\mu = \frac{e\hbar}{2m_0 i}\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x_\mu} - \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x_\mu}\right)\psi\right] \qquad (17.12)$$

حيث

$$x_4 = ict, \quad j_4 = ic\rho \qquad (17.13)$$

وتتطابق عبارة كثافة التيار (17.11) مع الحالة اللانسبية (2.26) ، أما كثافة الشحنة فهى تؤول إلى الحالة اللانسبية عندما $v \ll c$ ، انظر (2.26) ، وفى الحقيقة إذا بدلنا $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow E$ انظر (17.4) ، فإننا نجد بواسطة (17.10) العبارة التالية :

$$\rho = \frac{eE}{m_0 c^2} \psi^* \psi \qquad (17.14)$$

التى تؤول فى التقريب اللانسبى $E \approx m_0 c^2$ إلى الشكل العادى $\rho = e\psi^*\psi$.
إلا أنه فى النظرية النسبية من الممكن الحصول على حل ثان من أجل القيم السالبة للطاقة $E (E < 0)$ مما يعطى اشارة معاكسة للشحنة e فى عبارة الكثافة ρ . وهكذا نرى أنه من خلال المعادلة النسبية نستطيع دراسة الجسيمات ذات الشحنة الموجبة بالاضافة إلى الجسيمات ذات الشحنة السالبة (مثلا الميزونات ـ ρ المشحونة التى نطبق عليها هذه المعادلة) . غير أن مفهوم كثافة الجسيمات خلافا لمفهوم كثافة الشحنة :

$$\rho_0 = \frac{\rho}{e} = \frac{i\hbar}{2m_0 c^2} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi\right] \qquad (17.15)$$

يفقد معناه فى الحالة العامة لأن العبارة السابقة ليست مقدارا معينا موجبا ، خلافا للعبارة المقابلة فى النظرية اللانسبية التالية* :

$$\rho_0 = \psi^* \psi \qquad (17.16)$$

جـ) النظرية النسبية لذرة الهيدروجين (باهمال مغزل الالكترون) .

يجب حل هذه المسألة بواسطة التابع الموجى (17.6) الذى فيه :

$$A = 0, \quad e\Phi = V = -\frac{Ze_0^2}{r} \qquad (17.17)$$

وعندئذ نجد أن

$$\nabla^2 \psi + \frac{1}{c^2 \hbar^2} \{(E - V)^2 - m_0^2 c^4\} \psi = 0 \qquad (17.18)$$

* يمكن اعتبار أن ρ_0 مجرد اصطلاح يستخدم عندما تتواجد جسيمات طاقاتها موجبة .

وبما أن الطاقة الكامنة فى هذه المعادلة لا تتعلق بالزمن فيمكن تحويل المعادلة السابقة إلى الحالة المستقرة إذا فصلنا من الطاقة الكلية، التى تعتبر موجبة $E + m_0c^2 > 0$ ، الطاقة الذاتية للجسيم m_0c^2 وهكذا نكتب :

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r}) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E + m_0c^2)\, t\right] \qquad (17.19)$$

ثم إذا حسبنا بعد ذلك تأثير مؤثر الطاقة على التابع ψ السابق ، أى أن :

$$\mathrm{E}\psi(\boldsymbol{r}, t) = (E + m_0c^2)\, \psi(\boldsymbol{r}) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E + m_0c^2)\, t\right] \qquad (17.20)$$

نجد أن المعادلة (17.18) تأخذ الشكل التالى :

$$\nabla^2\psi + \frac{1}{c^2\hbar^2}\left[\left(E + m_0c^2 + \frac{Ze_0^2}{r}\right)^2 - m_0^2c^4\right]\psi = 0 \qquad (17.21)$$

وكما هو الحال فى نظرية شرودينجر ، سنبحث عن الحل بالشكل التالى :

$$\psi = R(r)\, Y_l^m(\vartheta, \varphi) \qquad (17.22)$$

وعندئذ نحصل على القسم القطرى الآتى :

$$\left(\nabla_r^2 - A + \frac{2B}{r} - \frac{l(l+1) - \alpha^2 Z^2}{r^2}\right) R = 0 \qquad (17.23)$$

حيث $\alpha = \frac{e_0^2}{c\hbar} \simeq \frac{1}{137}$ هو مقدار عديم البعد ويسمى بثابت البنية الدقيقة . أما A و B فهما ثابتان يعطيان بالعلاقتين :

$$A = \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\left[1 - \left(1 + \frac{E}{m_0c^2}\right)^2\right]$$
$$B = \frac{m_0Ze_0^2}{\hbar^2}\left[1 + \frac{E}{m_0c^2}\right] \qquad (17.24)$$

اللتين تؤولان إلى العبارة المقابلة فى النظرية اللانسبية ، انظر البند ١٢ ، ولن تؤثر قيم A و B المحسوبة بشكل أكثر دقة (دون اهمال التأثيرات النسبية) على حل المعادلة الموجية النسبية بالمقارنة مع حل معادلة شرودينجر هذا ويمكن تفسير ظهور الحد الاضافى $\frac{Z^2\alpha^2}{r^2}$ فى (17.23) كطاقة جذب اضافية نسبية متناسبة عكسا مع مربع البعد ، تلك الطاقة التى يمكن أن تغير فى بعض الحالات من شكل الحل ، وهذا ما سنراه بالتفصيل فيما بعد ،

ولندرس أولا الحل التقاربى R_0 عندما $r \to 0$ ، قبل كل شىء ، يمكن كتابة (17.23) فى هذه الحالة بالشكل :

$$\frac{1}{r}\frac{d^2(rR_0)}{dr^2} - \frac{l(l+1) - Z^2\alpha^2}{r^2} R_0 = 0 \qquad (17.25)$$

ولنبحث عن الحل بالشكل التالى :

$$R_0 = Cr^s$$

وعندئذ نجد لحساب s المعادلة التالية :

$$s(s+1) - l(l+1) + Z^2\alpha^2 = 0 \qquad (17.26)$$

وحلها الذى يكتب كالآتى :

$$s_{1,2} = -\tfrac{1}{2} \pm \sqrt{(l+\tfrac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2} \qquad (17.27)$$

وفى هذه الحالة يكون :

$$R_0 = C_1 r^{s_1} + C_2 r^{s_2}$$
$$Z\alpha < \tfrac{1}{2} \qquad (17.28)$$

أما إذا كان $Z\alpha < 1/2$ فإن كلا الجذرين s_1 و s_2 يكونان حقيقيين مهما كانت $l = 0, 1, 2, \ldots$ ، ويمكن عندئذ اختيار الحل R_0 الذى لا يباعد المقدار rR_0 بجوار الصفر ، أى يمكن أن نفرض $C_2 = 0$. ويجب عندئذ الاقتصار على الحل الأسى المتخامد عندما $C_2 = 0$ فى عبارة التابع الموجى من أجل $E < 0$ (عندما $A > 0$) . وان تحديد الحلين التقاربيين من كلا الجهتين يؤدى إلى حساب طيف الطاقة بنفس الطريقة التى حصلنا عليها فى نظرية شرودينجر ، انظر المعادلة (12.32) ، حيث نبدل l بـ s_1 . وعندئذ سنجد لحساب القيم الخاصة المعادلة التالية :

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = n_r + \tfrac{1}{2} + \sqrt{(l+\tfrac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2} \qquad (17.29)$$

وإذا عوضنا B و A بقيمتهما النسبيتين المحسوبتين فى (17.24) نجد أن :

$$E_{nl} = m_0c^2\left[1 + \frac{Z^2\alpha^2}{(n_r + 1/2 + \sqrt{(l + 1/2)^2 - Z^2\alpha^2})^2}\right]^{-1/2} - m_0c^2. \quad (17.30)$$

حيث $n = n_r + l + 1$ ، وإذا نشرنا العبارة الأخيرة فى متسلسلة (باعتبار $Z^2 \alpha^2$ صغيرا جدا) واقتصرنا على الحدين الأولين اللذين لا ينتهيان إلى الصفر نجد طيف الطاقة التالى :

$$E_{nl} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2}\left(\frac{n}{l + 1/2} - 3/4\right)\right] \quad (17.31)$$

فالحد الأول يتطابق مع ما يقابله فى النظرية اللانسبية ، أما الحد الثانى المتناسب مع ثابت البنية الدقيقة $\alpha = 1/137$ فهو التصحيح النسبى . وإن حساب التأثيرات النسبية جدير بالاهتمام لأنه يزيل انطباق السويات بالعدد الكوانتى ولهذا نرى أن السويات المنسوبة إلى العدد الكوانتى n تنقسم إلى n سوية جزئية قريبة من بعضها (بسبب صغر α^2) لأن العدد الكوانتى l يمكن أن يأخذ n قيمة $(l = 0, 1, 2, ..., n - 1)$. ولكى نقارن مع التجربة نحسب الانشطار الثنائى فى نطاق سلسلة بالمير $(n = 2)$ ، وبحساب مقدار الانشطار من (17.31) نجد أن :

$$\Delta\omega = \frac{E_{21} - E_{20}}{\hbar} = \frac{8}{3}\frac{R\alpha^2}{16} \quad (17.32)$$

وقد دلت المقارنة مع التجربة أن قيمة الانشطار الفعلى لسلسلة بالمير تساوى ثلاثة أضعاف ما حسب نظريا بالعلاقة (17.32) ويعود سبب هذا التناقض

إلى أن بنية السويات الدقيقة لذرة الهيدروجين لم تأخذ بعين الاعتبار حتى الآن تبعية الكتلة للسرعة . وكما سنرى فيما بعد ، لا بد من حساب مغزل الالكترون أى العزم الميكانيكى الذاتى ولقد فرض أولا أن معادلة كلين - جوردون يمكن أن تطبق لدراسة الالكترون النسبى ، غير أنه تبين أن هذه المعادلة تناسب الجسيمات التى ليس لها مغزل ، بينما مغزل الالكترون يساوى $1/2$ ، وعلى ما يظهر فإن معادلة كلين - جوردون تطبق على الميزونات - P_i التى مغزلها يساوى الصفر وبصورة خاصة يمكن لهذه

المعادلة أن تصف حركة الميزونات p حول النواة وقد حصل العلماء تجريبيا على هذه الميزونات .

ملاحظة : لندرس أخيرا الحالة الثانية من (17.27) عندما

$$Z\alpha > 1/2 \quad (17.33)$$

عندئذ ينتج حل جديد تماما . وفى الحقيقة يكون الجذران s_1 و s_2 عقدين عندما $l = 0$ ولهذا يأخذ الحل التقاربى الشكل التالى :

$$R_0 = \frac{1}{\sqrt{r}} (C_1 r^{i\gamma} + C_2 r^{-i\gamma}) \quad (17.34)$$

حيث $\gamma = \sqrt{Z^2\alpha^2 - 1/4}$ وعندئذ لن نستطيع كتابة الشرط $C_2 = 0$ أو $C_1 = 0$ لأن لكل من الحلين شذوذا عندما $r \to 0$ ، ولهذا نحصل على طيف مستمر عندما $l = 0$ وهو جائز بصورة عامة عند « سقوط » الجسيم فى المركز .

البند ١٨ ـ معادلة ديراك

تعتبر العلاقة التى تربط بين الكتلة m_0 والطاقة E والاندفاع p أساسا فى الميكانيكا الكوانتية النسبية ، وكما أشرنا فى البند السابق ، انظر (17.1) ، لكى نتخلص من عملية الجذر يمكن تربيع الطرفين وهذا ما فعلناه فى معادلة كلين ـ جوردون ـ تلك المعادلة التى تصف الجسيمات عديمة المغزل ، ولهذا لا تطبق على الالكترونات التى مغزلها يساوى $\frac{1}{2}$ (بوحدات $\hbar$) . وقد اقترح ديراك سنة ١٩٢٨ طريقة أخرى تتلخص فى « تخطيط » العلاقة (17.1) وهذا ما أدى إلى اكتشاف المعادلة الموجية النسبية للالكترون ذى المغزل $\frac{1}{2}$. ويجب أن نؤكد هنا أن عمل ديراك هذا كان الخطوة الثانية الهامة فى تطور دراسة الالكترون بعد الخطوة الأولى الممثلة فى معادلات مكسويل ـ لورنتز فى الكهرطيسية الكلاسيكية . ويمكن الحصول على معادلة شرودينجر اللانسبية ومعادلة باولى كتقريب لمعادلة ديراك .

أ) « **تخطيط** » **مؤثر الطاقة** : لكى تتم « عملية تخطيط » العلاقة بين الطاقة والاندفاع أو لاستخراج الجذر التربيعى من رباعى الحدود نكتب (17.1) بالشكل التالى :

$$E = c\sqrt{p^2 + m_0^2c^2} = c\sum_{\mu=0}^{3} \alpha_\mu p_\mu \qquad (18.1)$$

حيث

$$p_0 = m_0c, \quad p_1 = p_x, \quad p_2 = p_y, \quad p_3 = p_z \qquad (18.2)$$

وعندئذ نجد أن :

$$E^2 = c^2 \sum_{\mu=0}^{3} p_\mu p_\mu = c^2 (p^2 + m_0^2c^2) \qquad (18.3)$$

ولكى نوضح الشروط التى يجب أن تحققها المقادير α_μ نربع طرفى العلاقة (18.1) وعندئذ نجد ، بفرض أن الاندفاعات p_μ و $p_{\mu'}$ تتبادل مع بعضها * ، ان :

$$E^2 = c^2 \sum_{\mu}\sum_{\mu'} p_\mu p_{\mu'} \alpha_\mu \alpha_{\mu'} = \frac{c^2}{2}\sum_{\mu}\sum_{\mu'} p_\mu p_{\mu'} (\alpha_\mu \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_\mu) \qquad (18.4)$$

ولا تنطبق المساواة الأخيرة مع (18.3) إلا عندما تتحقق العلاقة :

$$\alpha_\mu \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_\mu = 2\delta_{\mu\mu'} \qquad (18.5)$$

أى عندما تحقق المقادير الأربعة α_μ العلاقة اللاتبادلية التالية :

$$\alpha_\mu \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_\mu = 0, \quad \mu \neq \mu' \qquad (18.6)$$

ويحقق مربع كل منها العلاقة

$$\alpha_\mu^2 = 1 \qquad (18.7)$$

ونذكر أن مصفوفات باولى ، انظر (16.26) ، تحقق خواص مشابهة :

---

* ان الاندفاعات المذكورة تتبادل مع بعضها حتى ولو اعتبرناها تواترات ، أى فى حالة غياب الحقل الكهرطيسى ، وهكذا نرى أنه يجب فى البداية استخراج الجذر أولا من المؤثر للجسيم الحر ثم تعميم المعادلة الناتجة على حالة وجود الحقل .

$$\sigma'_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma'_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma'_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad (18.8)$$

فهى بالضبط تحقق العلاقات نفسها ، انظر (16.28) ، ولاستخراج الجذر التربيعى فى الرباعية السابقة لا بد من أربع علاقات (18.5) (مع العلم أن $\mu = 0, 1, 2, 3$) والثلاث التى تحققها مصفوفات باولى لا تكفى . وللتغلب على هذه الصعوبة اقترح ديراك استخدام المصفوفات σ_n ، ρ_n ذات أربعة صفوف ترتبط بالمصفوفات ذات الصفوف الثنائية بالعلاقات التالية :

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} \sigma'_n & 0' \\ 0' & \sigma'_n \end{pmatrix} \quad (n = 1, 2, 3) \qquad (18.9)$$

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0' & I' \\ I' & 0' \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} 0' & -iI' \\ iI' & 0' \end{pmatrix}, \quad \rho_3 = \begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix} \qquad (18.10)$$

حيث σ'_n هى مصفوفات باولى أما $0'$ و I' فهى المصفوفات التالية :

$$0' = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad I' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (18.11)$$

وهذه المصفوفات لها أربعة صفوف تحقق نفس العلاقات التى تحققها مصفوفات باولى إذ من السهل أن نجد :

$$\sigma_n^2 = \rho_n^2 = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (18.12)$$

$$\sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1 = i\sigma_3 \qquad (18.13)$$

$$\rho_1\rho_2 = -\rho_2\rho_1 = i\rho_3 \qquad (18.14)$$

ويمكن كتابة العلاقة الأخيرة بالشكل التالى أيضا :

$$\sigma_n\sigma_{n'} + \sigma_{n'}\sigma_n = \rho_n\rho_{n'} + \rho_{n'}\rho_n = 2\delta_{nn'} \qquad (18.15)$$

ويجب أن يضاف إلى العلاقات السابقة العبدل التالى :

$$\sigma_n\rho_{n'} = \rho_{n'}\sigma_n, \qquad (18.16)$$

كما ويمكن البرهان على صحة العلاقة الأخيرة بالحساب المباشر انطلاقا من الصيغتين (18.9) و (18.10) ، أما فيما يتعلق بالمصفوفة α_μ فلقد اقترح ديراك استخدام المصفوفة التالية :

$$\alpha_n = \rho_1\sigma_n = \begin{pmatrix} 0' & \sigma_n' \\ \sigma_n' & 0' \end{pmatrix} \quad (n = 1, 2, 3)$$

$$\alpha_0 = \rho_3 = \begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix} \qquad (18.17)$$

وهى طبقا لـ (18.15) و (18.16) تحقق الشروط (18.5) ، وفى الحقيقة نجد أن :

$$\alpha_1^2 = \rho_1^2\sigma_1^2 = I, \quad \alpha_0^2 = \rho_3^2 = 1$$
$$\alpha_2\alpha_3 + \alpha_3\alpha_2 = \rho_1^2(\sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_2) = 0 \qquad (18.18)$$
$$\alpha_0\alpha_1 + \alpha_1\alpha_0 = \sigma_1(\rho_3\rho_1 + \rho_1\rho_3) = 0$$

وبكتابة هذه المصفوفة نجد أن :

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_0 = \rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (18.19)$$

ب) معادلة ديراك ، كثافة الشحنة وكثافة التيار . إذا كتبنا العلاقة النسبية (18.1) بين الطاقة والاندفاع ، المحولة إلى شكل خطى بواسطة المصفوفات α_μ بالمؤثرات فإننا نحصل على معادلة ديراك التالية :

$$(E - H)\psi = 0 \qquad (18.20)$$

حيث يعطى كلا من المؤثرين E و p بالعلاقة :

$$E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad p = -i\hbar\nabla$$

أما الهاملتونيان فيعرف بالعلاقة :

$$H = c(\alpha p) + \rho_3 m_0 c^2 \ . \qquad (18.21)$$

وعندما يتحرك الالكترون فى حقل كهرطيسى معطى بالكمونين A و Φ ، يمكن تطبيق المعادلتين (18.20) و (18.21) نفسهما على أن نكتب ، طبقا للقواعد العامة للميكانيكا الموجية القيم المعممة لمؤثرى الطاقة والاندفاع ، انظر (17.5) ، بدلا من القيمتين السابقتين أى أن :

$$F = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi, \quad \mathbf{P} = -i\hbar\nabla - \frac{e}{c} A \qquad (18.22)$$

ولهذا يمكن كتابة معادلة ديراك الموجية فى حالة وجود الحقل الكهرطيسى بالشكل التالى :

$$(F - c(\alpha\mathbf{P}) - \rho_3 m_0 c^2)\,\psi = 0 \qquad (18.23)$$

وبما أن كلا من α و ρ_3 مصفوفة ذات أربعة أعمدة فلا بد أن يتألف التابع الموجى ψ من أربع مركبات ندمجها معا بشكل مصفوفة مؤلفة من عمود واحد بالشكل التالى :

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \qquad (18.24)$$

أما المرافق الهرميتى لهذا التابع فهو

$$\psi^+ = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*) \qquad (18.25)$$

وهكذا تكافىء مصفوفة ديراك الموجية المصفوفية مجموعة المعادلات التالية :

$$\begin{aligned}
(F - m_0c^2)\,\psi_1 - c\,(P_x - iP_y)\,\psi_4 - cP_z\psi_3 &= 0 \\
(F - m_0c^2)\,\psi_2 - c\,(P_x + iP_y)\,\psi_3 + cP_z\psi_4 &= 0 \\
(F + m_0c^2)\,\psi_3 - c\,(P_x - iP_y)\,\psi_2 - cP_z\psi_1 &= 0 \\
(F + m_0c^2)\,\psi_4 - c\,(P_x + iP_y)\,\psi_1 + cP_z\psi_2 &= 0
\end{aligned} \qquad (18.26)$$

والمعادلة المرافقة عقديا يمكن أن تكتب بالشكل التالى :

$$\psi^+ (F - c(\alpha\mathbf{P}) - \rho_3 m_0 c^2) = 0 \qquad (18.27)$$

أما تأثير المؤثرين : $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ و $i\hbar\nabla$ - على التابع الموجى الموجود على اليسار من هذين المؤثرين فيكون بالشكل التالى :

$$-\psi^+ i\hbar\nabla \rightarrow i\hbar\nabla\psi^+, \quad \psi^+ i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^+ \qquad (18.28)$$

وهكذا نكتب المعادلتين (18.23) و (18.27) بالشكل التالى :

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\Phi\right)\psi-c\left(\alpha\ \left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}A\right)\right)\psi-\rho_3 m_0c^2\psi=0 \quad (18.29)$$

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\Phi\right)\psi^+-c\left(\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}A\right)\psi^+\alpha\right)-m_0c^2\psi^+\rho_3=0 \quad (18.30)$$

فإذا ضربنا (18.29) من اليسار بـ ψ^+ و (18.30) من اليمين بـ ψ ثم طرحنا الثانية من الأولى نجد العلاقة التالية :

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\psi^+\psi+\operatorname{div}\psi^+\alpha\psi=0 \quad (18.31)$$

التى تعتبر بمثابة معادلة الاستمرارية التى تربط بين كثافة الشحنة ρ وكثافة التيار j ، أى أن :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho+\operatorname{div}j=0 \quad (18.32)$$

حيث

$$\rho=e\psi^+\psi,\quad j=ec\psi^+\alpha\psi$$

ومن الواضح من العلاقة الأخيرة أنه يمكن تفسير المصفوفة $c\alpha$ كأنها مؤثر السرعة ، وبنشر المساواة (18.32) نجد أن :

$$\rho_0=\frac{\rho}{e}=\psi^+\psi=(\psi_1^*\psi_2^*\psi_3^*\psi_4^*)\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}=\psi_1^*\psi_1+\psi_2^*\psi_2+\psi_3^*\psi_3+\psi_4^*\psi_4 \quad (18.33)$$

أى أن ρ هى مصفوفة مؤلفة من عنصر واحد وبالتالى فهى تابع عادى ، وبنفس الطريقة من السهل البرهان أن :

$$\frac{j_x}{ec}=\psi^+\alpha_1\psi=(\psi_1^*\psi_2^*\psi_3^*\psi_4^*)\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}=(\psi_1^*\psi_2^*\psi_3^*\psi_4^*)\begin{pmatrix}\psi_4\\ \psi_3\\ \psi_2\\ \psi_1\end{pmatrix}=$$

$$=\psi_1^*\psi_4+\psi_2^*\psi_3+\psi_3^*\psi_2+\psi_4^*\psi_1 \quad (18.34)$$

ونلاحظ هنا ، خلافا لما وجدناه فى معادلة كلين - غوردون ، أن ρ_0 هو مقدار معين موجب ، ولكن هذا لا يعنى ضرورة اعتبار ρ_0 بمثابة كثافة

للجسيمات . وطبقا لنظرية ديراك تماما كما هو الحال فى نظرية كلين - غوردون يجب أن تتواجد جسيمات ذات شحنة موجبة - بوزيترونات .

جـ) الخواص التحويلية للتابع الموجى عند تطبيق تحويلات لورنتز والدورانات الفراغية . من المعلوم ، طبقا للنظرية النسبية الخاصة ، أن القوانين الفيزيائية يجب أن لا تتوقف على اختيار جملة الاحداثيات اللورنتزية ، ولهذا يجب أن يتغير كلا من معادلات مكسويل ومعادلات كلين - غوردون وكذلك معادلة ديراك بالنسبة لتحويلات لورنتز . ولندرس الخواص التحويلية لتابع ديراك الموجى ولهذا نكتب أولا تحويلات لورنتز .

$$ct' = ct\,\mathrm{ch}\,\gamma - x\,\mathrm{sh}\,\gamma,\quad x' = x\,\mathrm{ch}\,\gamma - ct\,\mathrm{sh}\,\gamma,\quad y' = y,\quad z' = z \qquad (18.35)$$

حيث

$$\mathrm{ch}\,\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}},\quad \mathrm{sh}\,\gamma = \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}},\quad \beta = \frac{v}{c}$$

ويجب أن يحقق هذا التحويل أى متجه معرف فى الفراغ الرباعى ، وبصورة خاصة كثافة الشحنة وكثافة التيار

$$c\rho' = c\rho\,\mathrm{ch}\,\gamma - j_x\,\mathrm{sh}\,\gamma,\quad j'_x = j_x\,\mathrm{ch}\,\gamma - c\rho\,\mathrm{sh}\,\gamma$$
$$j'_{y,z} = j_{y,z}$$

وانطلاقا من تعريف هذه القيم نجد استنادا إلى نظرية ديراك أن

$$\psi'^{+}\psi' = \psi^{+}(\mathrm{ch}\,\gamma - \alpha_1\,\mathrm{sh}\,\gamma)\psi = \psi^{+}e^{-\gamma\alpha_1}\psi.$$
$$\psi'^{+}\alpha_1\psi' = \psi^{+}(\alpha_1\,\mathrm{ch}\,\gamma - \mathrm{sh}\,\gamma)\psi = \psi^{+}\alpha_1 e^{-\gamma\alpha_1}\psi \qquad (18.36)$$
$$\psi'^{+}\alpha_{2,3}\psi' = \psi^{+}\alpha_{2,3}\psi$$

حيث استفدنا من العلاقة التالية :

$$e^{-\gamma\alpha_1} = \mathrm{ch}\,\gamma\alpha_1 - \mathrm{sh}\,\gamma\alpha_1 = \mathrm{ch}\,\gamma - \alpha_1\,\mathrm{sh}\,\gamma$$

وذلك لأن

$$\alpha_1^{2n} = 1,\quad \alpha_1^{2n+1} = \alpha_1$$

حيث n عدد صحيح . ولكى تتحقق العلاقات الأخرى يجب أن نجعل

$$\psi' = \left(\text{ch}\,\frac{\gamma}{2} - \alpha_1\,\text{sh}\,\frac{\gamma}{2}\right)\psi = e^{-\frac{\gamma}{2}\alpha_1}\psi$$

$$\psi'^{+} = \psi^{+}\left(\text{ch}\,\frac{\gamma}{2} - \alpha_1\,\text{sh}\,\frac{\gamma}{2}\right) = \psi^{+}e^{-\frac{\gamma}{2}\alpha_1} \qquad (18.37)$$

وعندئذ إذا أخذنا بعين الاعتبار العلاقة التالية :

$$\alpha_1 e^{-\frac{\gamma}{2}\alpha_1} = e^{-\frac{\gamma}{2}\alpha_1}\alpha_1, \quad \alpha_2 e^{-\frac{\gamma}{2}\alpha_1} = e^{\frac{\gamma}{2}\alpha_1}\alpha_2 \qquad (18.38)$$

فإنه من السهل برهان صحة المساواة (18.36) . ويتضح من (18.37) أن التوابع الموجية لا تتحول كمتجه (زوايا صحيحة γ) ولا تتحول كتنسور (مضاعفات الزاوية γ) وانما كنصف متجه يميز تحوله بالزاوية $\frac{\gamma}{2}$ وقد سميت المقادير التى تتحول بالقانون (18.37) سبينورات أو تنسورات المرتبة النصفية ويمكن البرهان بطريقة مشابهة أنه من أجل الدوران العادى (مثلا حول z بالزاوية φ) فإن السبينور يتحول طبقا للقاعدة التالية :

$$\psi' = e^{i\sigma_3\frac{\varphi}{2}}\psi, \quad \psi'^{+} = \psi^{+}e^{-i\sigma_3\frac{\varphi}{2}} \qquad (18.39)$$

وتنتج هذه العلاقة الأخيرة من تحويلات متجه التيار التالى :

$$\begin{aligned} j'_x &= j_x\cos\varphi + j_y\sin\varphi \\ j'_y &= j_y\cos\varphi - j_x\sin\varphi \\ j'_z &= j_z \end{aligned} \qquad (18.40)$$

التى تكتب فى نظرية ديراك بالشكل التالى :

$$\begin{aligned} \psi'^{+}\alpha_1\psi' &= \psi^{+}(\alpha_1\cos\varphi + \alpha_2\sin\varphi)\psi \\ \psi'^{+}\alpha_3\psi' &= \psi^{+}\alpha_3\psi \end{aligned} \qquad (18.41)$$

وهكذا . . . . فإذا عوضنا هنا ψ' بقيمتها من (18.39) آخذين بعين الاعتبار العلاقات :

$$\alpha_1 e^{i\sigma_3\frac{\varphi}{2}} = \alpha_1\left(\cos\frac{\varphi}{2} + i\sigma_3\sin\frac{\varphi}{2}\right) = \left(\cos\frac{\varphi}{2} - i\sigma_3\sin\frac{\varphi}{2}\right)\alpha_1 =$$

$$= e^{-i\sigma_3\frac{\varphi}{2}}\alpha_1, \quad \alpha_3 e^{i\sigma_3\frac{\varphi}{2}} = e^{i\sigma_3\frac{\varphi}{2}}\alpha_3$$

فإننا نحصل على المعادلة (18.40) .

البند ١٩ ـ حركة الكترون ديراك فى حقل القوى المركزية

أ) العزوم الحركية المدارى والمغزلى والكلى . لندرس قبل كل شىء قوانين مصونية العزم الحركى فى حقل القوى المركزية :

$$V = e\Phi(r) \qquad (19.1)$$

لقد برهنا سابقا فى نظرية شرودينجر اللانسبية أن العزم الحركى المدارى

$$\mathbf{L} = [r\mathbf{p}]$$

يكون مصونا ، إلا أنه فى نظرية ديراك ، حيث يؤخذ بعين الاعتبار مغزل الالكترون ، لا يتبادل العزم الحركى المدارى مع الهاملتونيان أى أنه لا يكون تكاملا للحركة.فإذا كتبنا الهاملتونيان بالشكل التالى :

$$H = c\alpha_1 p_x + c\alpha_2 p_y + c\alpha_3 p_z + \rho_3 m_0 c^2 + V(r) \qquad (19.2)$$

فإن المركبة* $L_z = (xp_y - yp_x)$ لا تتبادل مع الحدين الأوليين ، ويمكن التأكد من ذلك إذا كتبنا

$$HL_z - L_z H = c\alpha_1 p_y (p_x x - x p_x) - c\alpha_2 p_x (p_y y - y p_y) \qquad (19.3)$$

ثم نأخذ بعين الاعتبار المساواة

$$(p_x x - x p_x) = (p_y y - y p_y) = \frac{\hbar}{i}$$

فإننا نجد أخيرا :

$$HL_z - L_z H = \frac{c\hbar}{i}(\alpha_1 p_y - \alpha_2 p_x) \neq 0 \qquad (19.3a)$$

* نلاحظ أنه يمكن كتابة المركبة $L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$ ولهذا فهى تتبادل مع الطاقة الكامنة $V(r)$ فى حالة القوى المركزية .

ولايجاد قانون مصونية العزم للجسيمات ذات المغزل ينبغى استعمال علاقة ثانية هى التالية :

$$H\sigma_3 - \sigma_3 H = cp_x\rho_1(\sigma_1\sigma_3 - \sigma_3\sigma_1) + cp_y\rho_1(\sigma_2\sigma_3 - \sigma_3\sigma_2) =$$
$$= \frac{2c}{i}(\alpha_2 p_x - \alpha_1 p_y) \qquad (19.3b)$$

لنعرّف مؤثر العزم الحركى الكلى بالعلاقة التالية :

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \qquad (19.4)$$

أى أنه يساوى مجموع مؤثرى العزمين الحركى المدارى $\mathbf{L}$ والمغزل الذى يعطى بالعلاقة

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\sigma \qquad (19.4a)$$

وعندئذ نرى من (19.3a) و (19.3b) أن مركبة العزم الكلى (J_z فى هذه الحالة) هى وحدها التى تتبادل مع الهاملتونيان أى أنها تحقق قانون المصونية .

ب) **العلاقات التبادلية لمؤثر العزم** . لقد برهنا فى البند ١٠ أن مركبات العزم المدارى لا تتبادل فيما بينها وأنها تحقق العلاقة

$$L_xL_y - L_yL_x = i\hbar L \qquad (19.5)$$

إلى آخره ($x \to y \to z \to x$ ...) . أمّا مؤثر العزم الخاص (المغزل) فهو يتناسب مع مصفوفة ديراك ، أى أن :

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma} \qquad (19.6)$$

ولهذا لا تتبادل مركباته مع بعضها ، وبما أن مصفوفات باولى σ' ذات السطرين ومصفوفات ديراك ذات الأربعة الأسطر تحقق نفس القواعد التبديلية ، انظر (16.28) و (18.13) ، نجد أن لمغزل ديراك نفس العلاقات التبادلية التى وجدناها لمغزل باولى ، انظر (19.36) ، أى أن :

$$S_xS_y - S_yS_x = i\hbar S_z \qquad (19.6a)$$

إلخ . . . وعلى الرغم من أن مركبات العزمين المدارى والمغزلى هى مؤثرات تحقق نفس العلاقات التبادلية مع بعضها فهذه المركبات تتبادل فيما بينها لأنها ذات طبائع مختلفة وخواص مستقلة (اشتقاقات ومصفوفات) ، وإذا أخذنا هذه الملاحظات بعين الاعتبار فمن السهل الحصول على العلاقات التبادلية لمؤثر العزم الكلى (19.4) بشكل مشابه لـ (19.5) و (19.6a) أى أن :

$$J_xJ_y - J_yJ_x = (L_x + S_x)(L_y + S_y) - (L_y + S_y)(L_x + S_x) = \\ = i\hbar(L_z + S_z)$$

ومنه

$$\begin{aligned} J_xJ_y - J_yJ_x &= i\hbar J_z \\ J_yJ_z - J_zJ_y &= i\hbar J_x \\ J_zJ_x - J_xJ_z &= i\hbar J_y \end{aligned} \qquad (19.7)$$

وقد تم الحصول على العلاقتين الأخيرتين من العلاقة الأولى بالتبديل الدورى للاحداثيات ، أى أن :

$$x \to y,\ y \to z,\ z \to x,\ \ldots$$

أما مؤثر مربع العزم الكلى J^2 فيحوى على ثلاثة حدود أى :

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2(\mathbf{LS}) \qquad (19.8)$$

الحد الأول منها :

$$L^2 = -\hbar^2\nabla^2_{\vartheta,\varphi} \qquad (19.9)$$

هو مربع العزم المدارى ، وتعطى قيمته الخاصة عند تأثيره على التابع الكروى Y_l^m بالعلاقة :

$$L^2 \to \hbar^2 l(l+1) \qquad (19.9a)$$

أى أنه يصف الحالة الكوانتية عندما يساوى العزم المدارى l (بوحدات $\hbar$) ، أما الحد الثانى :

$$S^2 = \frac{1}{4}\hbar^2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2) = \frac{3}{4}\hbar^2 = s(s+1)\hbar^2 \qquad (19.10)$$

فهو عدد يصف المغزل (بوحدات $\hbar$) ويساوى $s = 1/2$ ، وأخيرا الحد الثالث التالى :

$$2(\mathbf{LS}) = 2(L_xS_x + L_yS_y + L_zS_z) \qquad (19.10a)$$

يصف ما يسمى بالتأثير المغزلى المدارى ، هذا ويجب التأكيد أن كلا من المركبتين L_z ، S_z تتبادل على انفراد مع L^2 و S^2 غير أن كلا منهما لا مع المؤثر (LS) . فى الحقيقة إذا اعتمدنا على المساويتين (19.5) و (19.6) فمن السهل البرهان أن :

$$\begin{aligned} L_z(\mathbf{LS}) - (\mathbf{LS})L_z &= i\hbar(L_yS_x - L_xS_y) \\ S_z(\mathbf{LS}) - (\mathbf{LS})S_z &= i\hbar(L_xS_y - L_yS_x) \end{aligned} \qquad (19.11)$$

ومنه نرى أن مركبة العزم الكلى وحدها يجب أن تتبادل مع هذا الحد ، أى أن :

$$(L_z + S_z)(\mathbf{LS}) - (\mathbf{LS})(L_z + S_z) = 0 \qquad (19.12)$$

وهذه المركبة نفسها (J_z) تتبادل أيضا مع J^2

$$J_zJ^2 - J^2J_z = 0 \qquad (19.13)$$

ولهذا يمكن أن يكون لمربع العزم الكلى ولأى من مركباته توابع خاصة واحدة فى المسائل التى يحفظ فيها العزم الكلى (مثلا حركة جسيم ذى مغزل فى حقل مركزى) . ونلاحظ أنه لا يمكن أن يكون لمركبتين من مركبات العزم الكلى تابع موجى عام لأنهما لا تتبادلان مع بعضهما ، انظر (19.7) .

جـ) جمع العزوم . لنحسب القسم الزاوى من التابع الموجى الذى يحقق قانون مصونية العزم الكلى الذى يساوى مجموع العزمين المدارى والمغزلى ولهذا نسمى مثل هذه المسألة بمسألة جمع العزوم ، وللتبسيط سنقتصر على دراسة تقريب باولى حيث يوصف المغزل بمصفوفة ذات سطرين ، وفى هذه الحالة نبحث عن الحل بشكل مصفوفة ذات مركبتين من الشكل التالى :

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \qquad (19.14)$$

بحيث تحقق بين عنصريها علاقة تأخذ بعين الاعتبار قانون مصونية العزم الحركى الكلى ، أى أن :

$$\begin{aligned} J^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} &= \left(L + \frac{1}{2}\hbar\sigma'\right)^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 j(j+1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \\ J_z \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} &= \left(L_z + \frac{1}{2}\hbar\sigma'_3\right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar m_j \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \end{aligned} \qquad (19.15)$$

حيث $L = [rp]$ مؤثر العزم المدارى σ' فى مصفوفة باولى . ولنبحث عن حل (19.15) بالشكل** :

$$\Psi_1 = C_1 Y_l^{m'}, \quad \Psi_2 = C_2 Y_l^m \qquad (19.16)$$

حيث Y_l^m هو التابع الكروى ، انظر البند ١٠ ، وعندئذ إذا لاحظنا أن :

$$L^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 l(l+1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \qquad (19.17)$$

فيمكن أن نجد طبقا لـ (19.15) ، (19.12) ، (19.13) ما يلى :

$$\frac{1}{\hbar}(\sigma' L) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = [j(j+1) - l(l+1) - 3/4] \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

أو

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar}[(L_x - iL_y)\Psi_2 + L_z\Psi_1] &= q\Psi_1 \\ \frac{1}{\hbar}[(L_x + iL_y)\Psi_1 - L_z\Psi_2] &= q\Psi_2 \end{aligned} \qquad (19.18)$$

حيث

$$q = j(j+1) - l(l+1) - 3/4 \qquad (19.18a)$$

وبالاستفادة من العلاقتين (10.87) و (10.89) حيث وجدنا أن :

$$L_z Y_l^m = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_l^m = m\hbar Y_l^m \qquad (19.19)$$

$$(L_x \pm iL_y) Y_l^m = -\hbar\sqrt{(l+1\pm m)(l \mp m)}\, Y_l^{m\pm 1} \qquad (19.20)$$

نلاحظ امكانية اختصار التابع الكروى فى القسمين الأيمن والأيسر من

---

* من القيم المختلفة لـ m و m' يحفظ فقط مربع العزم الحركى ولا يحتفظ مسقطه على z .

المعادلة (19.18) إذا جعلنا $m' = m - 1$ وعندئذ نجد أن الثوابت ترتبط فيما بينها بالعلاقة التالية :

$$\begin{aligned} (q - m + 1) C_1 + \sqrt{(l + 1 - m)(l + m)}\, C_2 = 0, \\ \sqrt{(l + 1 - m)(l + m)}\, C_1 + (q + m) C_2 = 0. \end{aligned} \qquad (19.21)$$

ومن شرط انعدام معين الأمثال لهذه المجموعة نحسب q التى تأخذ قيمتين تقابلان الحلين التاليين* :

$$q = l, \qquad j = l + \frac{1}{2}, \quad C_2 = -\sqrt{\frac{l - m + 1}{l + m}}\, C_1 \qquad (19.22)$$

$$q = -(l + 1), \quad j = l - \frac{1}{2}, \quad C_2 = \sqrt{\frac{l + m}{l - m + 1}}\, C_1 \qquad (19.23)$$

وتسمى العوامل C_1 و C_2 التى تحدد العلاقة بين التابعين الكرويين (بين العزم المدارى والمغزل فى هذه الحالة) عند جمع العزوم بعوامل كلبيش - جوردون . وبالاستفادة من شروط المعايرة $C_1^2 + C_2^2 = 1$ نكتب الحل الأول الموافق لـ (19.22) بالشكل التالى** :

$$\Psi^{(j=l+1/2)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{l + m}{2l + 1}}\, Y_l^{m-1} \\ -\sqrt{\dfrac{l + 1 - m}{2l + 1}}\, Y_l^m \end{pmatrix} = Y_{l,\, m}^{(j=l+1/2)} \qquad (19.24)$$

اما عندما $j = l - 1/2$ (الحل الثانى الموافق لـ (19.23)) فإننا نجد :

$$\Psi^{(j=l-1/2)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{l - m + 1}{2l + 1}}\, Y_l^{m-1} \\ \sqrt{\dfrac{l + m}{2l + 1}}\, Y_l^m \end{pmatrix} = Y_{l,\, m}^{(j=l-1/2)} \qquad (19.25)$$

حيث تسمى التوابع $Y_{l\,m}^{(j)}$ بالسبينورات الكروية التى تعاير وتتعامد حسب العلاقة :

---

* بالاضافة إلى هذين الحلين يوجد حلان آخران يعطيان قيما سالبة لـ j ولذلك اهملناهما .

** مع ملاحظة تحقق هذه العلاقة بين التوابع الكروية فى حالة التفاعل المغزلى المدارى وحده .

$$\oint d\Omega Y_{l'm'}^{(j')+} Y_{lm}^{(j)} = \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \qquad (19.26)$$

وحيث يقابل $j = l + 1/2$ الحالة التى يتجه فيها العزمان المدارى والمغزلى بنفس الجهة ، أما $j = l - 1/2$ فتقابل الحالة عندما يتجهان بجهتين متعاكستين . ومن السهل تطبيق الشرط (19.26) إذا علمنا أن السبينور الكروى $Y_{lm}^{(j)+}$ هو مصفوفة ذات سطر واحد وأخذنا بعين الاعتبار شرط معايرة وتعامد التوابع الكروية حيث تعتبر السبينورات الكروية (19.24) و (19.25) تعميما سبينوريا للتوابع الكروية (انظر البند ١٠) وتمثل القسم الزاوى من حل المسائل المرتبطة بحركة جسيم مغزله يساوى $1/2$ فى حقل مركزى ، وبتبديل الحلول Ψ الناتجة عن (19.14) نرى أن مسقط العزم الكلى J_z يأخذ القيم $J_z = \hbar m_j$ وبالاضافة إلى أن العدد الكوانتى m_j يساوى $m_j = m - 1/2$. وإذا أخذنا الحل الأول ($j = l + 1/2$) نرى من (19.24) أن m تتغير فى المجال من ($-j = -l - 1/2 = -l$ (m_j إلى $l + 1$ ($m_j = l + 1/2 = j$) أما من أجل الحل الثانى ($j = l - 1/2$) فنجد طبقا لـ (19.25) أن العدد m يتحول من ($m_j = -j$) $-l + 1$ إلى l ($m_j = j$)* وهكذا نلخص النتائج السابقة كما يلى :

ان لمربع العزم الكلى القيم الخاصة التالية :

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad j = \begin{cases} l \pm 1/2, & l \neq 0 \\ 1/2, & l = 0 \end{cases} \qquad (19.26a)$$

أى أن هذا العزم يكمم كالعزم المدارى ، إلا أن العدد j الذى يسمى فى هذه الحالة بالعدد الكوانتى الداخلى** يأخذ قيما نصف صحيحة ، أما مسقط العزم الكلى على المحور z فيتميز أيضا بقيم نصف صحيحة للعدد الكوانتى

---

* لقد وضعنا هذين الحدين باعتبار أن التابع الكروى Y_l^m ينعدم عندما $|m| > l$.

** ترتبط هذه التسمية بتاريخ المسألة فلقد استخدم علماء الطيوف العدد j قبل اكتشاف المغزل تجريبيا واصطلاح « داخلى » قد يعنى صفات داخلية للجسيمات ، من نوع ما كانت غير مفهومة فى ذلك العصر .

$$J_z = \hbar m_j, \quad m_j = -j, \ldots, +j \qquad (19.27)$$

من السهل الحصول على صيغ هامة فى علم الأطياف لتكميم الجداء العددى انطلاقا من العلاقات (19.8) - (19.10) ومن قواعد التكميم (19.26a) وهذه العلاقات هى

$$(\mathbf{LS}) = \frac{1}{2}(\mathrm{J}^2 - \mathrm{L}^2 - \mathrm{S}^2) = \frac{\hbar^2}{2}\{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\} \qquad (19.28)$$

و

$$(\mathbf{JS}) = \frac{1}{2}(\mathrm{J}^2 - \mathrm{L}^2 + \mathrm{S}^2) = \frac{\hbar^2}{2}\{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)\} \qquad (19.29)$$

د) حركة الجسيمات ذات المغزل فى حقل مركزى . الدوارة . إذا أردنا دراسة حركة جسيم فى حقل قوى مركزى فى التقريب اللانسبى ، ولكن بدون اهمال التأثيرات المغزلية ، فيجب علينا استخدام السبينورات الكروية $Y_{lm}^{(j)}$ التى تصف الحالة الكوانتية حيث يحتفظ العزم الحركى الكلى (المدارى والمغزلى) وذلك عوضا عن التوابع الكروية $Y_l^{m_l}$ التى تقابل مصونية العزم المدارى فقط . وبما أن السبينورات الكروية فى التقريب اللانسبى تحوى على توابع كروية لها نفس العدد الكوانتى l فإن القسم القطرى فى هذه الحالة يحقق نفس المعادلة التى حققها فى الحالة اللانسبية أى أن :

$$\nabla_r^2 R + \left(\frac{2m_0 E}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R = 0 \qquad (19.30)$$

وهكذا يكون للتوابع الموجية للالكترون المتحرك فى حقل مركزى الشكل التالى :

$$\Psi = R Y_{lm}^{(j)} \qquad (19.31)$$

حيث يعطى السبينور الكروى بالعبارتين (19.24) و (19.25) . وفى الحالة الخاصة عندما ندرس الدوّارة حيث $r = a = \mathrm{const}$ يكون القسم القطرى

مساويا الواحد $R = 1$ وعندئذ لن تعطى التأثيرات المغزلية أى طاقة اضافية وتساوى طاقةالدوارة عندئذ :

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 a^2} \quad (19.32)$$

أما فيما يتعلق بالتابع الموجى فهو يعطى بالسبينور $Y^{(j)}_{lm}$ ولهذا تخضع الأعداد الكوانتية l, m_j, j لنفس قواعد الانتقاء المطبقة على أى مسألة تتعلق بالحقل المركزى بما فيها الدوّارة وذرة الهيدروجين . وسنرى الآن عوضا عن العلاقات ، انظر البند ١١ ، التى استنتجنا على أساسها قواعد الانتقاء ، العلاقات التالية :

$$\langle l'm'j' | q | lmj \rangle = \oint (Y^{(j')}_{l'm'})^+ q Y^{(j)}_{lm} \, d\Omega \quad (19.33)$$

وحيث تأخذ q فى هذه العلاقة ثلاث قيم :

$$q = z = \cos\vartheta, \quad q = x \pm iy = \sin\vartheta e^{\pm i\varphi} \quad (19.34)$$

(للتبسيط جعلنا نصف قطر الدوّارة يساوى الواحد) . وبتعويض السبينورات الكروية بقيمها من (19.24) أو (19.25) نحصل على العنصر المصفوفى التالى :

$$\langle l'm'j' | q | lmj \rangle =$$
$$= D^{(l'l)} \oint (Y^{m'-1}_{l'})^* q Y^{m-1}_{l} \, d\Omega + C^{(l'l)} \oint (Y^{m'}_{l'})^* q Y^{m}_{l} \, d\Omega \quad (19.35)$$

ومنه نرى أن التكاملين فى (19.35) يتطابقان مع التكاملين (11.14) - (11.16) ولهذا نجد أن للعددين l و m قواعد الاختيار نفسها التى وجدناها فى الدوارة عديمة المغزل أى أن :

$$\Delta l = l - l' = \pm 1, \quad \Delta m = 0 \quad (q = z), \quad \Delta m = \pm 1 \quad (q = x \pm iy) \quad (19.36)$$

ولنبحث عن قواعد الاختيار للعددين j و m_j ان m_j ترتبط مع m فى الحلين السابقين (19.24) و (19.25) بالعلاقة نفسها أى $m_j = m - 1/2$

ولهذا يجب كتابة قاعدة الاختيار بالشكل نفسه لكل منهما أى :

$$\Delta m_j = 0, \ \pm 1 \qquad (19.37)$$

ولكى نعين قاعدة الاختيار بالعدد j ندرس المسألة بفرض أن الانتقالات تحدث بين حالتين لهما نفس نوع الحل $(j' = l' + 1/2 \rightarrow j = l + 1/2)$ ، أو $(j = l' - 1/2 \rightarrow j = l - 1/2)$ وعندئذ يكون المعاملان $D^{(j')}$ و $C^{(j'j)}$ موجبين دوما ، كما يلاحظ من (19.24) و (19.25) أن هذه الانتقالات ممكنة وعندئذ يتغير العدد j كما يتغير العدد l أى $\Delta j = \Delta l \pm 1$ ، أما إذا درسنا الانتقالات بين حالتين تتميزان بنوعين مختلفين من الحلول :

$$j' = l' - 1/2 \rightarrow j = l + 1/2 \text{ أو } j = l' + 1/2 \rightarrow j = l - 1/2$$

فإننا نجد باعتبار $\Delta l = \pm 1$ أن $\Delta j = 0 + 2, -2$. ويجب الانتباه هنا إلى أن للمعاملين $D^{(j'j)}$ و $C^{(j'j)}$ اشارتين مختلفتين اضافة إلى ذلك يبدو أن الحدين يتباينان مع بعضهما عندما $\Delta j = \pm 2$ مما يمنع هذا الانتقال . أما عندما $\Delta j = 0$ فلا ينعدم الفرق ولكن شدة الاشعاع الناتج هنا ستكون أضعف من تلك الشدة الناتجة عن نوعين متشابهين من الحلول عندما $\Delta j = \pm 1$ ، لأن كلا من الحدين يشارك باشارة مختلفة ، وهكذا نأخذ قاعدة الانتقاء بالأعداد الكوانتية فى الحقل المركزى ، دون اهمال التأثيرات المغزلية ، الشكل التالى :

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m_j = 0, \ \pm 1 \qquad (19.38)$$

$$\Delta j = \begin{cases} \pm 1 & (\text{شدة عادية}) \\ 0 & (\text{شدة أضعف}) \end{cases}$$

هـ) معادلة ديراك فى التقريب اللانسبى (الباولى) والتقريب النسبى الضعيف . إذا أردنا تطبيق معادلة ديراك على دراسة حركة الالكترونات ذات السرعات الصغيرة بالنسبة لسرعة الضوء $(\vartheta / c \ll 1)$ فلن تأثير الحقل المغناطيسى الناتج عن المغزل على الالكترون يظهر عند اعتبار

الحدود من المرتبة ϑ/c (تقريب باولى اللانسبى) وتظهر التأثيرات المغزلية ، عند دراسة حركة الالكترون فى حقل كهربائى أثناء حساب الحدود من المرتبة $(\vartheta/c)^2$ (التقريب النسبى الضعيف)* ولهذا نستطيع كتابة معادلة ديراك بشكلها التقريبي ، فى حالة السرع غير الكبيرة جدا ، بالاقتصار على الحدود ذات المرتبة $(\vartheta/c)^2$ كحد أعلى ، ويظهر بوضوح ضمن هذا التقريب ، كما سنرى بعد قليل ، دور كل من الحدود النسبية والمغزلية . ولهذه الغاية نكتب معادلة ديراك (18.23) بشكلها المصفوفى :

$$\left[F\begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & I' \end{pmatrix} - c\left(\begin{pmatrix} 0' & \sigma' \\ \sigma' & 0' \end{pmatrix}\mathbf{P}\right) - m_0c^2\begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = 0$$

وعندئذ إذا فصلناها إلى معادلتين مصفوفيتين تحوى كل منهما على مصفوفة ذات سطرين ، انظر (18.17) و (18.11) ، فإننا نحصل عوضا عن المعادلة السابقة على المعادلتين التاليتين :

$$\begin{aligned} (F - m_0c^2)\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} &= c\,(\sigma'\mathbf{P})\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \\ (F + m_0c^2)\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} &= c\,(\sigma'\mathbf{P})\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \end{aligned} \qquad (19.39)$$

وبالرغم من أن للمعادلة الأخيرة شكلا جديدا فهى لا تكون شكلا مضبوطا من معادلة ديراك ، انظر (18.26) . تتعلق مركبات التابع الموجى ψ_ρ فى المعادلة (19.39) بصورة عامة بالزمن أى $\psi_\rho(r, t)$ وإذا لم يتعلق الحقلان الكهربائى والمغناطيسى بالزمن فيمكن الانتقال إلى الحالة المستقرة :

---

* نذكر أنه فى التحريك الكهربائى (الالكترودىناميكا) تحسب الحدود من المرتبة الأولى فى الصغر للمقدار v/c لأن c التى تساوى سرعة الضوء ، بوجود الحقلين الكهربائى والمغناطيسى ، والتى تعبر عن النسبة بين المقادير المقاسة فى وحدات كهربائية مغناطيسية ، أما التحريك الكهربائى النسبى فيبدأ اعتبارا من الحدود ذات المرتبة الثانية فى الصغر من (v/c) .

$$\psi_p(\boldsymbol{r}, t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E + m_0c^2)\, t\right]\psi_p(\boldsymbol{r}) \qquad (19.40)$$

والاقتصار على دراسة الطاقة الموجبة $E + m_0c^2 > 0$ ، فاصلين بذلك الطاقة الخاصة m_0c^2 عن الطاقة الكلية ويبدو أن هذه الطريقة مفيدة جدا لدراسة الحركة التى تحدث بسرع صغيرة حيث يكون للحدود اللانسبية القسط الأكبر . وبتعويض (19.40) فى (19.39) ثم الاقتصار على الحد الزمنى $\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E + m_0c^2)\, t\right]$ فإننا نجد

$$(E - e\Phi)\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = c\,(\sigma'\mathbf{P})\begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} \qquad (19.41)$$

$$(2m_0c^2 + E - e\Phi)\begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} = c\,(\sigma'\mathbf{P})\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} \qquad (19.42)$$

ومن الأخيرة نجد أن :

$$\begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} = \frac{1}{2m_0c}\left(1 + \frac{E - e\Phi}{2m_0c^2}\right)^{-1}(\sigma'\mathbf{P})\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} \qquad (19.43)$$

ولنلاحظ أن المعادلتين (19.41) و (19.43) خلافا لـ (19.39) لا تحويان الزمن . ولنبين أولا طريقة الحصول على معادلة باولى حيث تحسب فقط الحدود من المرتبة v/c (التقريب اللانسبى) . فإذا لاحظنا $E - e\Phi = \frac{m_0v^2}{2}$ فيمكن اهمال المقدار $\frac{E - e\Phi}{2m_0c^2}$ أمام الواحد ، وعندئذ نحصل من (19.43) على :

$$\begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} = \frac{(\sigma'\mathbf{P})}{2m_0c}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} \qquad (19.44)$$

وعندما تكون الطاقة موجبة تصبح المركبتان $\begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}$ « صغيرتين » من المرتبة v/c بالنسبة للمركبتين « الكبيرتين » $\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}$ لأن * $\frac{P}{m_0c} \sim \frac{v}{c}$.

---

* نجد من أجل قيم الطاقة السالبة عندما $E \to -|E| - m_0c^2$ على العكس ، أما المركبتين $\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}$ تكونان « الصغيرتين » والمركبتين $\begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}$ تكون « الكبيرتين » .

ولنحذف المركبتين « الصغيرتين » وذلك بتعويض (19.44) فى (19.41)
فنجد لحساب المركبتين « الكبيرتين » المعادلة التالية :

$$(E - e\Phi)\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \frac{1}{2m_0}(\sigma'\mathbf{P})(\sigma'\mathbf{P})\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}$$

ثم إذا أخذنا بعين الاعتبار العلاقة * التى تصح من أجل مصفوفة باولى ومصفوفات ديراك :

$$(\sigma' a)(\sigma' b) = (ab) + i(\sigma'[ab]) \qquad (19.45)$$

فإننا نجد

$$(\sigma'\mathbf{P})(\sigma'\mathbf{P}) = \mathbf{P}^2 + i(\sigma'[\mathbf{PP}])$$

ثم بتعويض P بقيمتها المعروفة

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} - \frac{e}{c}A$$

نجد أن :

$$[\mathbf{PP}]\psi = -\frac{e}{c}([\mathbf{p}A] + [A\mathbf{p}])\psi$$

وبملاحظة أن المؤثر P يؤثر على التوابع التى تقع على يمينه فإنه يمكن أن تكتب :

$$[\mathbf{p}A]\psi = -[A\mathbf{p}]\psi + \psi[\mathbf{p}A] = -[A\mathbf{p}]\psi + \frac{\hbar}{i}\mathcal{H}\psi$$

حيث $\mathcal{H}$ = rot A هو شدة الحقل المغناطيسى ، وبالتالى نجد أن :

$$[\mathbf{PP}]\psi = -\frac{e\hbar}{ic}\mathcal{H}\psi$$

ولهذا يكون :

$$(\sigma'\mathbf{P})(\sigma'\mathbf{P}) = \mathbf{P}^2 - \frac{e\hbar}{c}(\sigma'\mathcal{H})$$

• لبرهان هذه المساواة نكتب القسم الايسر من (19.45) بالشكل التالى :

$$(\sigma' a)(\sigma' b) = (\sigma'_1 a_x + \sigma'_2 a_y + \sigma'_3 a_z)(\sigma'_1 b_x + \sigma'_2 b_y + \sigma'_3 b_z)$$

وباعتبار $\sigma_1'^2 = I'$ و $\sigma'_1\sigma'_2 = -\sigma'_2\sigma'_1 = i\sigma'_3$ . . . ، انظر (16.27) (16.28) ، نجد أن

$$(\sigma' a)(\sigma' b) = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z + i\sigma'_3(a_x b_y - a_y b_x) +$$
$$+ i\sigma'_2(a_z b_x - a_x b_z) + i\sigma'_1(a_y b_z - a_z b_y)$$

أى أن معادلة ديراك تؤول ، إذا أخذنا بعين الاعتبار الحدود المتناسبة مع ϑ/c وحدها ، إلى معادلة باولى ، انظر (16.20) ، أو

$$\left(E - e\Phi - \frac{P^2}{2m_0} + \frac{e\hbar}{2m_0c}(\sigma'\mathscr{H})\right)\psi = 0 \quad (19.46)$$

ان ظهور الحد الاضافى التالى :

$$V^{magn} - -(\mu\mathscr{H})$$

الذى يعتبر تصحيحا على طاقة الالكترون ، يؤدى إلى أن يكون لهذا الالكترون عزم مغناطيسى هو :

$$\mu = \frac{e\hbar}{2m_0c}\sigma' \quad (19.47)$$

هذا العزم الذى حسبت قيمته فى نظرية باولى انطلاقا من المعطيات التجريبية . وبما أن هذا العزم المغناطيسى (يسمى أحيانا العزم المغناطيسى الحركى أو الديراكى) يظهر عند الانتقال إلى التقريب اللانسبى الذى يأخذ بعين الاعتبار الحدود من المرتبة الأولى للصغر للمقدار ϑ/c فيجب أن يكون للطاقة المغناطيسية V^{magn} نفس المرتبة بـ ϑ/c بالنسبة للطاقة اللانسبية . وإذا لأحظنا قيمة العزم الميكانيكى للالكترون ، انظر (19.4a) ، أى أن :

$$S = \frac{\hbar}{2}\sigma'$$

فيمكن الحصول كنتيجة لنظرية ديراك على العلاقة التالية :

$$\mu = \frac{e}{m_0c}S \quad (19.48)$$

وهى نفس العلاقة التى وضعت سابقا لتفسير تجربة اينشتين ـ دى هاز . ولندرس الآن تأثير الظواهر النسبية والمغزلية على حركة الالكترون فى حقل كهربائى (كولونى مثلا) ، ولهذا يجب ابقاء الحدود المغزلية بالاضافة إلى الحدود ذات المرتبة $(v/c)^2$ ثم اهمال الكمون المتجه ($A = 0$) أى أن

$P=p$. هذا بالاضافة إلى أنه عند الانتقال إلى التقريب المشار إليه أى من التوابع ذات الأربع مركبات إلى التوابع ذات المركبتين يجب اعادة المعايرة انطلاقا من العلاقة :

$$(\psi_1^*\psi_2^*\psi_3^*\psi_4^*)\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}=(\Psi_1^*\Psi_2^*)\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} \qquad (19.49)$$

وبفرض أن

$$\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=N\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix},\quad (\psi_1^*\psi_2^*)=(\Psi_1^*\Psi_2^*)\,N$$

فاننا نحصل للمركبات « الصغيرة » بدلالة « الكبيرة » بالتقريب إلى $(v/c)^2$ على العبارات التالية :

$$\begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}=\frac{1}{2m_0c}\left(1-\frac{E-e\Phi}{2m_0c^2}\right)(\sigma'\mathbf{p})\,N\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} \qquad (19.50)$$

ثم إذا لاحظنا أن $(\sigma p)(\sigma \mathbf{p})=\mathbf{p}^2$ واقتصرنا فيما يلى على الحدود التى تتجاوز المرتبة الثانية فى الصغر للمقدار $(v/c)^2$ ، فإننا نجد بواسطة شروط اعادة المعايرة (19.49) ما يلى :

$$(\Psi_1^*\Psi_2^*)\left(N^2+N\frac{\mathbf{p}^2}{4m_0^2c^2}N\right)\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix}=(\Psi_1^*\Psi_2^*)\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix}$$

ومنه نحصل على العلاقة التالية :

$$N=1-\frac{\mathbf{p}^2}{8m_0^2c^2} \qquad (19.51)$$

هذا ويمكن التحقق من صحة (19.51) إذا بدلنا قيمة N فى المساواة السابقة ، ولهذا نحصل ضمن هذا التقريب على المعادلتين التاليتين :

$$\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=\left(1-\frac{\mathbf{p}^2}{8m_0^2c^2}\right)\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}=\frac{1}{2m_0c}\left(1-\frac{E-e\Phi}{2m_0c^2}-\frac{\mathbf{p}^2}{8m_0^2c^2}\right)(\sigma'\mathbf{p})\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} \qquad (19.52)$$

وبالمناسبة نلاحظ فى تقريب باولى (الذى يأخذ بعين الاعتبار الحدود من المرتبة الأولى (أى v/c) ان معامل المعايرة السابق يساوى الواحد . وبتبديل العبارة السابقة فى (19.41) نجد أن :

$$\left\{E - e\Phi - \frac{1}{8m_0^2c^2}(E - e\Phi)\,p^2\right\}\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} =$$
$$= \left\{\frac{p^2}{2m_0} - (\sigma' p)\frac{E - e\Phi}{4m_0^2c^2}(\sigma' p) - \frac{p^4}{16m_0^3c^2}\right\}\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} \quad (19.53)$$

ولنكتب الآن العلاقات التى سنحتاج إليها فيما بعد* :

$$(\sigma' p)(E - e\Phi)(\sigma' p) = (E - e\Phi)\,p^2 - i\hbar e(\sigma' \mathscr{E})(\sigma' p) =$$
$$= (E - e\Phi)\,p^2 - i\hbar e(\mathscr{E} p) + e\hbar(\sigma'[\mathscr{E} p]) \quad (19.54)$$

و

$$\frac{p^4}{2m_0} = p^2(E - e\Phi) = (E - e\Phi)\,p^2 + \frac{2\hbar e}{i}(\mathscr{E} p) + \hbar^2 e\nabla^2\Phi \quad (19.55)$$

حيث $\nabla\Phi = \mathscr{E}$ هو قيمة الحقل الكهربائى أما المؤثران ∇ و ∇^2 فيؤثران على الكمون Φ فقط ومن (19.55) نجد أن :

$$(E - e\Phi)\,p^2 = \frac{p^4}{2m_0} + 2i\hbar e(\mathscr{E} p) - \hbar^2 e\nabla^2\Phi \quad (19.56)$$

وبتعويض (19.54) و (19.56) فى (19.53) نجد معادلة ديراك فى التقريب المدروس ، أى أن :

$$\left(E - e\Phi - \frac{p^2}{2m_0}\right)\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} = V'\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} \quad (19.57)$$

حيث تساوى الطاقة المضافة ذات المرتبة $(v/c)^2$ إلى معادلة شرودينجر اللانسبية أى أن :

$$V' = -\frac{p^4}{8m_0^3c^2} - \frac{e\hbar}{4m_0^2c^2}(\sigma'[\mathscr{E} p]) + \frac{\hbar^2 e}{8m_0^2c^2}\nabla^2\Phi \quad (19.58)$$

وحيث يمثل الطرف الأيسر من المعادلة (19.57) حركة الجسيم فى حقل كهربائى راسخ ضمن التقريب اللانسبى . أما فى القسم الأيمن منها فتوجد طاقة التفاعل الاضافية التى تصف التأثيرات المغزلية النسبية ، حيث يمثل الحد الأول من الطرف الأيسن فى المساواة الأخيرة :

* من الواضح أن (19.54) و (19.55) هما علاقتان بين المؤثرات ، ولهذا يكون من الضرورى عند برهانهما أن يؤثر كلا من المؤثرين p و σ' على تابع موجى (مصفوفة) يفترض أنه على يمين هذه العلاقتين .

$$V^{\mathrm{rel}} = -\frac{p^4}{8m_0^3c^2} \qquad (19.59)$$

يمثل التصحيح الإضافى على السرعة المغزلية للجسيم ، ويجب أن تظهر هذه الطاقة الاضافية ، أيضا فى معادلة كلين - جوردون المماثلة ، ويمكن الحصول على المماثل الكلاسيكى لهذا الحد عند نشر الهاملتونيان والاقتصار على الحدود ذات المرتبة الثانية $(v/c)^2$ حيث نجد أن :

$$H = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2} = m_0c^2 + \frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3c^2}$$

أما الحد الثانى فى (19.58) فيمثل ما يسمى بالتفاعل المغزلى المدارى :

$$V^{s.-o.} = -\frac{e\hbar}{4m_0^2c^2}(\sigma' [\mathscr{E}\mathbf{p}]) \qquad (19.60)$$

وهو يصف تفاعل العزم المغناطيسى للجسيم المتحرك مع الحقل الكهربائى .

ملاحظة : يمكن تفسير ظهور هذا الحد فى النظرية الكلاسيكية بما يلى : يكتسب العزم المغناطيسى لجسيم متحرك بسرعة v باعتبار أن هذا العزم هو مركبة فراغية (تينزرية) يكتسب عزما كهربائيا اضافيا يساوى المركبة الفراغية الزمنية للمقدار التنسورى التالى :

$$\mu_{el} = \frac{1}{c}[v\mu] = \frac{1}{m_0c}[p\mu] \qquad (19.61)$$

ونتيجة لذلك يكتسب الالكترون تفاعلا اضافيا مع الحقل الكهربائى للنواة هو :

$$V^{\mathrm{cl}} = -(\mathscr{E}\mu_{el}) = -\frac{e\hbar}{2m_0^2c^2}(\sigma' [\mathscr{E}p]) \qquad (19.62)$$

وهو أكبر بمرتين مما رأيناه فى الحالة الكوانتية ، انظر (19.60) ، ومن الملاحظ أنه حدثت محاولة قبل ظهور نظرية ديراك ، لتفسير البنية الدقيقة بطريقة نصف كلاسيكية وذلك بواسطة التفاعل المدارى - المغزلى . ولكى يتم التوافق مع التجربة كان لا بد من وضع معامل يساوى $1/2$ كما اقترح كلا من توماس والعالم السوفيتى النظرى فرينكل ، ولقد سمى هذا المعامل الذى ينتج آليا فى نظرية ديراك بتصحيح توماس - فرينكل .

ولنحسب $^{s.-o.}$ باعتبار أن $\mathscr{E}$ هو الحقل الكولونى للنواة الذى يحسب بالشكل التالى :

$$\Phi = \frac{Ze_0}{r}, \quad \mathscr{E} = \frac{Ze_0 r}{r^3}, \quad e = -e_0 \qquad (19.63)$$

وإذا بدلنا فى (19.60) نجد أن $V^{s.-o.}$ يساوى :

$$V^{s.-o.} = \frac{Ze_0^2 (SL)}{2m_0^2 c^2 r^3} \qquad (19.64)$$

حيث $S = \frac{\hbar}{2}\sigma'$ هو العزم المغزلى و $L = [rp]$ هو العزم المدارى . هذا ويجب أن ينعدم التفاعل المدارى المغزلى (19.64) فى الحالة s ، حيث ينعدم العزم المدارى . وأخيرا فإن الحد الاضافى الباقى فى نهاية الطرف الأيمن من (19.58) يساوى :

$$V^{cont} = \frac{\hbar^2 e}{8m_0^2 c^2} \nabla^2 \Phi = \frac{\pi \hbar^2 Z e_0^2}{2m_0^2 c^2} \delta(r) \qquad (19.65)$$

هذا الحد يسمى بالتفاعل التماسى ، أما الطاقة الاضافية المقابلة له فهى

$$\Delta E^{cont} = \int \Psi^+ V^{cont} \Psi \, d^3x \qquad (19.65a)$$

التى تتناسب مع $|\Psi(0)|^2$ وهى تختلف عن الصفر فقط فى الحالة s ($l = 0$) لأنه $|\Psi(0)|^2$ تختلف عن الصفر فقط فى هذه الحالة ، وهذا المقدار ينعدم دائما عندما $r = 0$. وانطلاقا من ذلك يمكن دراسة الحد التماسى كحالة خاصة من التفاعل المدارى المغزلى الذى يحصل عندما $l = 0$ وهكذا نرى أن الحدين الأخيرين (19.58) يميزان الخواص المغزلية للالكترون .

و) **معادلة ديراك للنترون والبروتون** . من المعلوم أن معادلة ديراك تصف حركة الجسيمات ذات المغزل $1/2$ وهى لا تطبق فقط على الالكترون بل على البروتون والنترون ، ويجب عند وجود الحقل الكهربائى

أن نعتبر شحنة البروتون وحدها إلا أنه يتولد لكل من البروتون والنترون عزم مغناطيسى،يخلق عند ظهور الحقل الكهربائى،سمى بالعزم المغناطيسى الشاذ ، ويجب التذكير بأن طاقة تفاعل الجسيم الديراكى المشحون مع الحقل الكهرطيسى ، تساوى

$$V_e = e\Phi - e(\alpha A) \qquad (19.66)$$

هذه الطاقة الناتجة عن وجود عزم ميكانيكى خاص ($\frac{\hbar}{2}\sigma$) ، والمحتواة أيضا فى التقريب اللانسبى،تضم العزم المغناطيسى الديراكى :

$$\mu_e = \frac{e\hbar}{2m_0c}\sigma \qquad (19.66a)$$

ولكن يجب عند الانتقال إلى الحالة النسبية أن نضع القيمة النسبية $\frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}}$ عوضا عن m_0 ، ولهذا ينعدم العزم المغناطيسى الديراكى عندما تزداد السرعة ، وصولا إلى القيمة فوق النسبية $(v \sim c)$. ويمكن أن يكون للجسيم عزم مغناطيسى شاذ لا ينعدم حتى فى السرع فوق النسبية بالاضافة إلى العزم المغناطيسى الديراكى الذى يظهر فقط فى التقريب اللا نسبى والذى تتعين قيمته بشحنة الجسيم . ونشكل الآن طاقة تفاعل العزم المغناطيسى الشاذ مع الحقل الكهربائى ، ان طاقة تفاعل الالكترون (19.66) مع الحقل الكهرطيسى ستكون مقدارا عدديا من وجهة نظر الفراغ الرباعى وفى الحقيقة أن الكمون العددى والشعاعى يؤلفان متجها رباعيا هو :

$$i\Phi = A_4, \quad A_x = A_1, \quad A_y = A_2, \quad A_z = A_3$$

وبالضبط فإن مصفوفة الواحدة هى المركبة الرابعة لمصفوفة السرعة $(\alpha_4 = iI^*)$ ومنه نرى امكانية تمثيل طاقة التفاعل (19.66) فى الفراغ الرباعى كمقدار عددى هو :

• بعبارة أدق تخضع المقادير $j_\mu = ec\psi^+\alpha_\mu\psi$ ، انظر (18.32) ، حيث $\alpha_\mu = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, iI)$ تخضع إلى قانون تحويل المتجه الرباعى .

$$V_e = -e \sum_{\mu=1}^{4} \alpha_\mu A_\mu \qquad (19.66b)$$

ومن المعلوم أن مركبات الحقل الكهرطيسى تشكل رتلا لا متناظرا من المرتبة الثانية ، أى أن :

$$\mathscr{H}_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} \qquad (19.67)$$

حيث

$$x_4 = ict.$$

ومنه نجد

$$\begin{aligned} \mathscr{H}_x &= \mathscr{H}_{23}, \quad \mathscr{H}_y = \mathscr{H}_{31}, \quad \mathscr{H}_z = \mathscr{H}_{12} \\ i\mathscr{E}_x &= \mathscr{H}_{41}, \quad i\mathscr{E}_y = \mathscr{H}_{42}, \quad i\mathscr{E}_z = \mathscr{H}_{43} \end{aligned} \qquad (19.68)$$

ولهذا يجب كتابة طاقة تفاعل العزم المغناطيسى الشاذ μ مع الحقل الكهربائى بالشكل التالى :

$$V_m = \mu \sum_{\mu,\nu=1}^{4} \alpha_{\mu\nu} \mathscr{H}_{\mu\nu} \qquad (19.69)$$

حيث $\alpha_{\mu\nu}$ هى مصفوفة من المرتبة الثانية مؤلفة من مصفوفة* ديراك . فإذا استخدمنا قوانين التحويل اللورنتزى للتابع الموجى ، انظر (18.39) أو الدورانية الفراغية فيمكن البرهان أن عناصر المصفوفة المؤلفة للرتل من المرتبة الثانية هى الكميات :

$$\begin{aligned} \alpha_{23} &= \rho_3\sigma_1, \quad \alpha_{31} = \rho_3\sigma_2, \quad \alpha_{12} = \rho_3\sigma_3, \quad \alpha_{41} = -i\rho_2\sigma_1 \\ \alpha_{42} &= -i\rho_2\sigma_2, \quad \alpha_{43} = -i\rho_2\sigma_3 \end{aligned} \qquad (19.70)$$

ولهذا تأخذ طاقة تفاعل العزم المغناطيسى الشاذ مع الحقل الكهربائى ، الشكل التالى :

$$V_m = \mu\,[\rho_3(\sigma\mathscr{H}) + \rho_2(\sigma\mathscr{E})] \qquad (19.71)$$

---

* بعبارة أدق أن الرتل من المرتبة الثانية هو المصفوفه $\psi^+\alpha_{\mu\nu}\psi$

ويؤخذ المغناطيون النووى كوحدة لقياس العزوم المغناطيسية للبروتون والنترون وبصورة عامة يعطى بالعلاقة التالية :

$$\mu_{nucl} = \frac{e_0 h}{2m_p c} = \frac{m_0}{m_p}\mu_0 = \frac{1}{1836,1}\mu_0 = 0,505 \cdot 10^{-23} \text{ erg} \cdot \text{gauss}^{-1}$$

وهـو يساوى القيمـة الديراكيـة للعـزم المغناطـيسى للبروتـون ($\mu_p^{Dir} = \mu_{nucl}$) . . . ويرتبط وجود هـذا العـزم بوجـود الشحنـة عنـد البروتون ($e_p = e_0$) ووجود العزم الميكانيكى الخاص (أى المغزل) مع العلم أن m_p هى كتلة البروتون و μ_0 مغناطيون بور . وقد بـرهنت المعطيات التجريبية أن للبروتون ، بالاضافة إلى ذلك ، عزما مغناطيسيا شاذا يساوى

$$\mu_p^{anom} = 1,79\mu_{nucl}$$

وهو ما يجب أن نضعه فى (19.71) خلافا للعزم المغناطيسى الديراكى نرى أن العزم الشاذ يحتفظ بقيمته فى التقريب اللانسبى ولا ينعدم فى التقريب فوق النسبى . وهكذا يساوى العزم المغناطيسى الكلى للبروتون ، طبقا للتقريب النسبى ما يلى :

$$\mu_p = \mu_p^{Dir} + \mu_p^{anom} = 2,79\mu_{nucl}$$

وبما أن شحنة النترون تساوى الصفر ، فإن عزمه المغناطيسى الديراكى يساوى الصفر أيضا ولكن لهذا النترون ، كما برهنت تجارب بلوخ - الفاريز ، عزما مغناطيسيا شاذا يساوى :

$$\mu_n = -1,91\mu_{nucl}$$

أن ظهور العزم المغناطيسى الشاذ عند البروتون والنترون مرتبط بتفاعلهما النووى مع حقل الميزون p_i (التفاعل القوى*) .

* نلاحظ أن التفاعل القوى بين البروتون والنترون يفوق التفاعل الكهرطيسى من أجل الأبعاد النووية الصغيرة من رتبة 10^{-13} . أما من أجل الأبعاد الذرية الكبيرة ($10^{-8} - 10^{-9}$) فإن التفاعل القوى قصير الأجل وينعدم عمليا .

البند ٢٠ ـ البنية الدقيقة لطيف الذرات الشبيهة بالهيدروجين

أ) صياغة المسألة . ينتج من نظرية حركة الالكترون فى الحقل الكولونى للنواة (الذرة الشبيهة بالهيدروجين) ، طبقا لمعادلة شرودينجر أن عبارة الطاقة هى :

$$E_n^0 = -\frac{RhZ^2}{n^2} \qquad (20.1)$$

وهى تتوافق مع المعطيات التجريبية إلا أنه لا يمكن قبول هذه القيمة إلا فى التقريب الصفرى . وقد برهنت الدراسة التفصيلية لطيوف الذرات أن للخطوط الطيفية بنية دقيقة لا يمكن فهمها استنادا إلى نظرية شرودينجر ، حيث لا تؤخذ بعين الاعتبار تابعية كتلة الالكترون إلى سرعته والتأثيرات المغزلية ، ومن الممكن صياغة نظرية لذرة الهيدروجين تأخذ بعين الاعتبار البنية الدقيقة لهذه الذرة ، انطلاقا من معادلة ديراك . ونلاحظ أولا امكانية حل معادلة كبلر بكل دقة بواسطة نظرية ديراك إلا أن هذا الحساب يتطلب من الناحية الرياضية عمليات ضخمة أكثر تعقيدا من الحسابات بواسطة نظرية شرودينجر ، وليس من السهل دائما ادراك الفكرة الفيزيائية الكامنة وراء هذه الحسابات ، ولهذا سنستخدم لحل المعادلة طريقة أبسط تعتمد على الصيغ التقريبية فى البند السابق . وهذه الطريقة تسمح بالحصول على صيغ بدقة تصل إلى حدود المرتبة $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ ، بالاضافة إلى أنها تعطى تفسيرا للحدود الأخرى ، كنتيجة لظهور الخواص النسبية والمغزلية للالكترون .

ب) حساب التأثيرات النسبية والمغزلية . إذا اعتبرنا التأثيرات المغزلية كما رأينا فى البند ١٩ ، انظر (19.24) و (19.25) ، يكون للتابع الموجى الشكل التالى :

$$\Psi = R_{nl} Y_{lm}^{(l)} \qquad (20.2)$$

حيث $Y_{lm}^{(l)}$ السبينور الكروى ، مع العلم أنه عندما $j = l+1/2$ فإن المغزل يوازى العزم المدارى وعندما $j = l-1/2$ يعاكسه ، اما R_{nl} فهو القسم القطرى من التابع الموجى . ويمكن استخدام الحل (20.2) لحساب سويات الطاقة التى تأخذ بعين الاعتبار الحدود من المرتبة $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ والتي تحوى التفاعل المدارى المغزلى المتناسب مع (LS) ، انظر (19.64) ، بالرغم من أن هذا الحل يختص بالتقريب الصفرى . ويعود سبب ذلك إلى أن مؤثر التفاعل المغزلى ـ المدارى يتبادل مع مركبة العزم الكلى على J_z وحدها ، انظر (19.11) و (19.12) وان الحل (20.2) هو بالضبط التابع الخاص لهذا المؤثر* . ولهذا يستخدم الحل (20.2) عندما لا تؤثر على الذرة أية قوى خارجية اضطرابية تفوق فى قيمتها قوى التفاعل المغزلى المدارى ، أما إذا لم يتحقق ذلك فإن الرابطة المغزلية المدارية تتمزق ويجب عندئذ صياغة العلاقة بين التوابع الكروية الداخلة فى (20.2) انطلاقا من معطيات جديدة للمسألة . كما أن السبينورات الكروية ، كالتوابع الكروية ، تحقق المعادلة :

$$\nabla_{\theta,\varphi}^2 Y_{lm}^{(l)} = -l(l+1) Y_{lm}^{(l)} \qquad (20.3)$$

ولهذا نجد نفس المعادلة التى استخدمت فى حالة مسألة شرودينجر اللانسبية ، لحساب القسم القطرى فى (20.2) وهى التالية :

$$\nabla_r^2 R_{nl} + \left(\frac{2m_0 E_n^0}{\hbar^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\frac{Ze_0^2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R_{nl} = 0$$

حيث تتعين قواعد الاختيار تماما لكل الأعداد الكوانتية بواسطة التابع (20.2) ؛ ذلك لأن قواعد الاختبار للعدد الكوانتى الرئيسى n ستبقى كما

---

* بهذا الصدد نذكر أنه يمكن اختيار الحل فى التقريب الصفرى بالشكل التالى :

$$\psi = R_{nl} Y_l^m \qquad (20.2a)$$

حيث Y_l^m هو التابع الكروى ، غير أن العبارة (20.2a) هى التابع الخاص للمؤثر L_z الذى لا يتبادل مع مؤثر التفاعل المغزلى ـ المدارى ، ولهذا لا يصلح الحل (20.2a) لحساب البنية الدقيقة الناتجة ، بصورة خاصة ، عن التفاعل المغزلى ـ المدارى .

كانت فى نظرية شرودينجر ، انظر (12.68) . وإذا أخذنا كل ذلك بعين الاعتبار فإننا نحصل على قواعد الاختيار للذرة الشبيهة بالهيدروجين دون اهمال التأثيرات المغزلية ، أى أن :

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta j = 0, \ \pm 1, \quad \Delta m_j = 0, \ \pm 1 \qquad (20.4)$$

حيث $-\Delta n-$ عدد صحيح وفى مسألتنا هذه يمكن حساب التصحيح المناسب على الطاقة (20.1) فى التقريب الصفرى ، إذا علمنا التقريب الصفرى للتابع الموجى (20.2) وطاقة التفاعل الاضافية الناجمة عن التأثيرات النسبية والمغزلية ، انظر (19.59) ، كما أن التصحيح النسبى لسويات الطاقة طبقا للعلاقة (19.59) هو التالى :

$$\Delta E^{\text{rel}} = -\int \left(\Psi^{(l)}\right)^{+} \frac{\mathrm{p}^4}{8 m_0^3 c^2} \Psi^{(l)} d^3x \qquad (20.5)$$

وفى الحالة المدروسة يكون :

$$\frac{\mathrm{p}^2}{2m_0} \Psi^{(l)} = \left(E_n^0 + \frac{Ze_0^2}{r}\right) \Psi^{(l)} \qquad (20.6)$$

$$\left(\Psi^{(l)}\right)^{+} \frac{\mathrm{p}^2}{2m_0} = \left(\Psi^{(l)}\right)^{+} \left(E_n^0 + \frac{Ze_0^2}{r}\right)$$

وهذا التفاعل الاضافى لا يتعلق بالزاويتين الكرويتين φ و ϑ ، ولهذا بملاحظة التكامل بالزاوية المجسمة

$$\oint d\Omega \left(Y_{lm}^{(l)}\right)^{+} Y_{lm}^{(l)} = 1 \qquad (20.7)$$

نحصل على الطاقة الاضافية الخاصة بالتأثيرات النسبية :

$$\Delta E^{\text{rel}} = -\frac{1}{2m_0 c^2} \left[(E_n^0)^2 + 2E_n^0 Z e_0^2 \langle r^{-1} \rangle + Z^2 e_0^4 \langle r^{-2} \rangle \right] =$$

$$= -\frac{R\hbar Z^4 \alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{l + 1/2} - \frac{3}{4} \right) \qquad (20.8)$$

حيث $\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$ هو ثابت البنية الدقيقة ، مع العلم أننا استفدنا من المساواة (12.40) كى نحصل على العلاقة الأخيرة ، تلك المساواة التى ينتج منها أن :

$$\langle r^{-1}\rangle = \frac{Z}{a_0}\frac{1}{n^2} = \frac{2R\hbar Z}{e_0^2 n^2}$$

$$\langle r^{-2}\rangle = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 \frac{1}{n^3(l+{}^1/_2)} = \frac{2RZ^2m_0}{\hbar n^3(l+{}^1/_2)}$$

وتتطابق الصيغة (20.8) مع عبارة الطاقة النسبية الاضافية التى حسبت فى نفس التقريب بواسطة معادلة كلين ـ جوردون النسبية ، انظر (17.31) ، وبالطريقة نفسها وبمساعدة (19.64) نحسب الطاقة الاضافية الناجمة عن التفاعل المغزلى المدارى :

$$\Delta E^{s.-o.} = \frac{Ze_0^2}{2m_0^2c^2}(SL)\langle r^{-3}\rangle \qquad (20.9)$$

وبالاستفادة من حساب $\langle r^{-3}\rangle$ الوارد فى (12.40a) نكتب :

$$\langle r^{-3}\rangle = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \frac{1}{n^3 l(l+{}^1/_2)(l+1)}$$

ومن حساب عبارة (SL) الواردة فى (19.28) و (19.18a) التى تعطى

$$(SL) = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2}q & , \quad l\neq 0 \\ 0 & , \quad l=0 \end{cases}$$

نحصل للطاقة (20.9) على القيمة التالية :

$$\Delta E^{s.-o.} = R\hbar\frac{Z^4\alpha^2}{2n^3}\frac{q(1-\delta_{l0})}{l(l+{}^1/_2)(l+1)} \qquad (20.10)$$

حيث تمثل الرموز فى العلاقات الأخيرة ما يلى :

$$q = j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) = \begin{cases} l & j=l+{}^1/_2 \\ -(l+1) & j=l-{}^1/_2 \end{cases} \qquad (20.11)$$

$$\delta_{l0} = \begin{cases} 0 & , \quad l\neq 0 \\ 1 & , \quad l=0 \end{cases} \qquad (20.12)$$

وأخيرا نحسب الطاقة التى تقابل التفاعل التماسى ، وهى تساوى طبقا لـ (19.65) إلى :

$$\Delta E^{cont} = \pi\frac{\hbar^2 Ze_0^2}{2m_0^2c^2}|\Psi(0)|^2$$

حيث

$$|\Psi(0)|^2 = R_{nl}^2(0)\, Y_{lm}^{(l)+} Y_{lm}^{(l)} \qquad (20.13)$$

ثم إذا أخذنا بعين الاعتبار العلاقة

$$|R_{nl}(0)|^2 = \frac{4}{n^3}\delta_{l0}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3$$

انظر (12.40) ، وعلمنا أن :

$$|Y_{lm}^{(l)}|^2 = \frac{1}{4\pi} \text{ عندما } l = 0 \text{ و } j = 1/2$$

فإننا نجد* :

$$|\Psi(0)|^2 = \frac{\delta_{l0}}{\pi n^3}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \qquad (20.14)$$

أى أن

$$\Delta E^{\text{cont}} = R\hbar\frac{Z^4\alpha^2}{n^3}\delta_{l0} \;{}^{*)} \qquad (20.15)$$

ومنه نجد الطاقة الاضافية التى تأخذ بعين الاعتبار كلا من التأثيرات النسبية والتفاعلات المغزلية ـ المدارية وكذلك التفاعلات التلامسية ، وهذه الطاقة هى التالية :

$$\Delta E = \Delta E^{\text{rel}} + \Delta E^{s.-o.} + \Delta E^{\text{cont}} =$$
$$= -R\hbar\frac{Z^4\alpha^2}{n^4}\left[\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} - \frac{qn(1-\delta_{l0})}{2l(l+1/2)(l+1)} - n\delta_{l0}\right]$$

وبتبديل قيمة q من (20.11) نجد أن :

$$\Delta E_{nl} = -R\hbar\frac{Z^4\alpha^2}{n^4}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right) \qquad (20.16)$$

---

* والجدير بالذكر امكانية استنتاج (20.15) بطريقة ثانية كنهاية لـ (20.10) التى تعطى التفاعل المغزلى المدارى من أجل $l \to 0$ عندما نهمل الحد δ_{l0} . ولهذا نرى كثيرا من المؤلفين يحصلون على العلاقة (20.17) بدون ادخال فرضية التفاعل التماسى ، لكن هذا التطابق عرضى لأن مقام العبارة (20.10) يساوى الصفر دائما فى الحالة s أما البسط فينعدم فى التقريب النسبى وحده ، وفى بعض الحالات الأخرى ، عندما توجد فى الذرة مجموعة الكترونات ، لا يمكن الحصول على الطاقة التماسية كحالة خاصة من التفاعل المغزلى المدارى .

وعليه نحصل على صيغة البنية الدقيقة لطيف ذرة الهيدروجين إذا دمجنا النتيجتين (20.1) و (20.16) ، أى أن :

$$E_{nj} = E_n^0 + \Delta E_{nj} = -\frac{RhZ^2}{n^2}\left[1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right)\right] \quad (20.17)$$

ومنه نجد أن تباعد السويات الطاقية يتناسب مع مربع ثابت البنية الدقيقة للذرة الشبيهة بالهيدروجين .

ملاحظة : يعطى الحل الدقيق لمعادلة ديراك تعميم العلاقة (17.30) الذى لا يهمل التأثيرات النسبية عند وجود المغزل :

$$E_{nj} = m_0c^2\left[1 + \frac{Z^2\alpha^2}{(n - j - 1/2 + \sqrt{(j+1/2)^2 - Z^2\alpha^2})^2}\right]^{-1/2} - m_0c^2 \quad (20.17a)$$

ويمكن الحصول على (20.17) انطلاقا من (20.17a) إذا تم نشر هذه الأخيرة بسلسلة ، باعتبار أن $Z^2\alpha^2$ لا متناهى فى الصغر ، والاقتصار على الحدين الأوليين . فإذا أخذنا القيمة الصغرى لـ j ، وهى $j = 1/2$ ، نجد أن الحركة المستقرة فى الحقل الكولونى لنواة تمتد طبقا لنظرية ديراك حتى $Z_{cr} = 137$ بينما تصل قيمتها الحدودية ، فى نظرية كلين - جوردون ، عندما $Z_{cr} = 1/2 \cdot 137$ ، انظر (17.33) ، ويعود سبب التزايد فى قيمة Z_{cr} إلى أن التأثيرات المغزلية تكافىء جزئيا التأثيرات النسبية ، وهكذا نرى أن الحالة المستقرة (بما فيها السوية الدنيا) للالكترون فى الحقل الكولونى $V = -\frac{Ze_0^2}{r}$ (أى الحركة التى تكون فيها الطاقة سالبة $E < 0$)، وهذه الحالة محدودة بقيمة عظمى للطاقة الكامنة ($Z_{cr} = 137$) مما يؤدى إلى طاقة حرجة : $E_{cr} = -m_0c^2$ أما عندما $Z > Z_{cr}$ فيصبح ممكنا ظهور الأزدواج الكترون - بوزيترون (تناقض كلين) وعندئذ لا يوجد أى معنى لمسألة الجسيم الواحد ، وبهذه المناسبة نذكر أنه يمكن الحصول على الحالات المستقرة (بما فيها الحالة الدنيا) لأى قيمة من الطاقة ، إذا وضعت الالكترونات فى حقل مغناطيسى ثابت ومتجانس .

جـ) دراسة البنية الدقيقة طبقا لنظرية ديراك . يبدو أن سويات طاقة ذرة الهيدروجين عند حساب البنية الدقيقة لهذه الذرة تتبع أيضا العدد الكوانتى الداخلى j ، حيث تعطى الحدود الذرية بالعلاقة :

$$(nlj) = -\frac{E_{nlj}}{h} = \frac{RZ^2}{n^2}\left[1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right)\right] \quad (20.18)$$

ومنه نجد أن البنية الدقيقة طبقا لنظرية ديراك تتعلق فقط بالعدد الكوانتى

$E/\hbar = 0$

$3d_{5/2}$
$3p_{3/2}, 3d_{3/2}$
$3s_{1/2}, 3p_{1/2}$

$2p_{3/2}$
$2s_{1/2}, 2p_{1/2}$

$1s_{1/2}$

الشكل ٢٠ ـ ١ . مخطط سويات الطاقة لذرة الهيدروجين .

الرئيسى n والعدد الكوانتى الداخلى j وهى ، خلافا لنظرية كلين - جوردون اللانسبية ، لا تتعلق بالعدد الكوانتى المدارى l . ويبدو من المخطط (الشكل ٢٠ ـ ١) ، انقسام الحدود إلى قسمين لأن كل قيمة لـ l تقابل قيمتين لـ j فمثلا نجد عوضا عن الحد $2p$ $(l = 1)$ الحدين $2p_{1/2}$ و $2p_{1/2}$ ؛ وتشذ عن ذلك الحدود s $(l=0)$ ، التى تعطى لـ j قيمة واحدة هى $(j = 1/2)$ وهكذا نرى أن حساب التأثيرات النسبية والمغزلية يؤدى إلى بعض الانخفاض فى الحدود s ولكن لا يؤدى إلى انقسامها (الشكل ٢٠ ـ ١) ، ونلاحظ أنه يصيب رتبة الانطباق بعض التغير نتيجة لانقسام السويات الطاقوية ، وفى الحقيقة يمكن للعدد الكوانتى الرئيسى أن يأخذ القيم التالية : $n = 1, 2, 3, 4, \ldots$. ويتغير العدد الكوانتى المدارى l من القيمة $l = 0$ (الحالة s) إلى القيمة $l = n - 1$ ، أما العدد الكوانتى الداخلى فيأخذ القيم $j = l \pm 1/2$ $(l \neq 0)$ و $j = 1/2$ $(l = 0)$ وأخيرا يتحول العدد الكوانتى m_j من $m_j = -j$ إلى $m_j = +j$ أى أنه يأخذ $2j + 1$ قيمة نصف صحيحة من أجل قيمة معينة لـ j .

وهكذا نرى أن رتبة الانطباق التى يتميز بها أى حقل مركزى ، والمرتبطة بتكافؤ الاتجاهات المختلفة ، تساوى $2j + 1$ (تذكر بأنها تساوى $2l + 1$ للجسيمات عديمة المغزل) ، هذا بالاضافة إلى وجود انطباق خاص فى الحقل الكولونى بالعدد l (لأن الطاقة لا تتعلق بـ l) . وبما أن العدد الكوانتى l يمكن أن يأخذ قيمتين من أجل j معينة ($l = j \pm 1/2$) فان رتبة الانطباق الكلية تصبح $2(2j + 1)$ وتشذ عن ذلك الحالة $j = n - 1/2$ لأن l يمكن أن تأخذ عندئذ القيمة $l = j - 1/2$ (تذكر بأن الحالة $l = n$ محظورة) ، وتكون رتبة الانطباق لهذه الحالة $2j + 1$ ، ونلاحظ أن أى اخلال بالحقل الكولونى للشحنة النقطية (أخذ أبعاد النواة أو التصحيحات الفراغية بعين الاعتبار) ينزع تماما الانطباق بـ l . ولحساب تباعد الخطوط الطيفية من الضرورى أن نأخذ بعين الاعتبار قانون الاختيار (20.4) ، وعندئذ نجد عوضا عن سلسلة لايمان السلسلتين :

$$\omega^{(1)} = (1s_{1/2}) - (np_{1/2})$$

(وهى خطوط ضعيفة الشدة لأن $\Delta j = 0$) . أو

$$\omega^{(2)} = (1s_{1/2}) - (np_{3/2}) \qquad (20.19)$$

أما بالنسبة لسلسلة بالمير فنجد الانقسامات التالية :

$$\begin{aligned}
\omega^{(1)} &= (2s_{1/2}) - (np_{1/2}) \\
\omega^{(2)} &= (2s_{1/2}) - (np_{3/2}) \\
\omega^{(3)} &= (2p_{1/2}) - (ns_{1/2}) \\
\omega^{(4)} &= (2p_{1/2}) - (nd_{3/2}) \qquad (20.20) \\
\omega^{(5)} &= (2p_{3/2}) - (ns_{1/2}) \\
\omega^{(6)} &= (2p_{3/2}) - (nd_{3/2}) \\
\omega^{(7)} &= (2p_{3/2}) - (nd_{3/2})
\end{aligned}$$

مع العلم أن الخط الطيفى $(2p_{1/2}) - (nd_{3/2})$ يجب أن يختفى لأن فى هذه

الحالة يكون $\Delta j = 2$ (انتقال ممنوع) . ونلاحظ أنه إذا بقى الانطباق بـ l فإن الخطين الطيفيين $\omega^{(1)}$ و $\omega^{(3)}$ وكذلك $\omega^{(2)}$ و $\omega^{(4)}$ يتطابقان لأن لسويتيهما البدائية والنهائية العدد الكوانتى الرئيسى نفسه والعدد الكوانتى الداخلى j نفسه ، وبالطريقة نفسها يمكن حساب قانون تباعد السويات الأخرى ، وعندئذ نرى أن أخفض سوية طاقوية تتعرض للتباعد هى السوية $n = 2$ ، وقد درست هذه الحالة فى ذرة الهيدروجين ($Z = 1$) دراسة تجريبية دقيقة ، فإن السوية $n = 2$ يجب أن تنقسم إلى ثلاث سويات ، وطبقا للنظرية التى شرحناها الآن سنجد اثنين منها أى أن :

$$\begin{aligned} (2s_{1/2}) &= (2p_{1/2}) = \frac{R}{4}\left[1 + \frac{\alpha^2}{4}\left(2 - \frac{3}{4}\right)\right] \\ (2p_{3/2}) &= \frac{R}{4}\left[1 + \frac{\alpha^2}{4}\left(1 - \frac{3}{4}\right)\right] \end{aligned} \tag{20.21}$$

ونحسب تواتر الانتقالات بينهما طبقا لنظرية ديراك فنجد :

$$\Delta\omega^{Д} = (2p_{1/2}) - (2p_{3/2}) = R\frac{\alpha^2}{16} \tag{20.22}$$

وهذا ما يساوى : $1,095 \cdot 10^4$ MHz . وفى الوقت نفسه ، بحساب هذا التباعد (بأخذ التأثيرات المغزلية وحدها بعين الاعتبار) وكذلك معادلة كلين - جوردون ، انظر (17.32) ، نجد أن :

$$\Delta\omega^{K-G} = (2s) - (2p) = \frac{8}{3}\,\frac{R\alpha^2}{16} \tag{20.23}$$

وهو أكبر بثلاث مرات مما وجدناه فى نظرية ديراك ، وهكذا نرى أن أخذ الخواص المغزلية بعين الاعتبار يقلل من التأثيرات النسبية . وقد أكدت التجارب صحة نتائج نظرية ديراك بدقة عالية ، ومن الطريف أن نذكر بهذه المناسبة أن زومرفيلد هو أول من حصل على البنية الدقيقة للطيف طبقا لنظرية بور نصف الكلاسيكية ، بعد أن أدخل فيها العبارة النسبية للهاملتونيان ، وقد حصل زومرفيلد طبقا للنظرية النسبية واللا مغزلية على العبارة ، انظر (20.22) ، التالية :

$$\Delta\omega_{Som} = (2s) - (2p) = \frac{R\alpha^2}{16} \qquad (20.24)$$

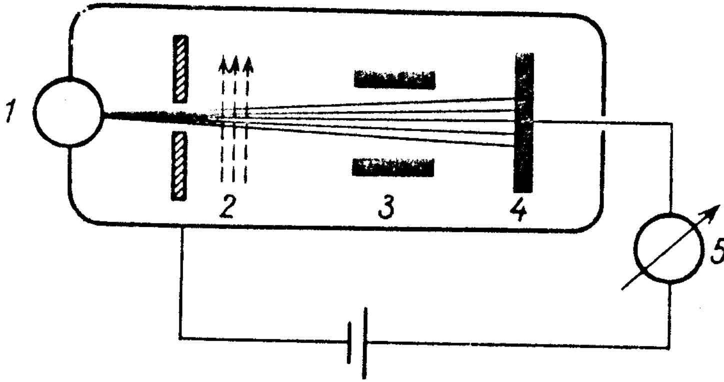
ويبدو أن تطابق نتائج زومرفيلد وديراك عرضى لأن التأثيرات المغزلية فى نظرية زومرفيلد لم تحسب ولهذا لم تتمكن من الحصول على ثلاث سويات تلك السويات التى تأكد وجودها فيما بعد تجريبيا .

د) **التحقيق التجريبى لنظرية البنية الدقيقة** . ان النجاح الكبير الذى أحرزته نظرية ديراك هو تفسيرها للبنية الدقيقة للأطياف الذرية ، كنتيجة لظهور التأثيرات النسبية والمغزلية ، إلا أن التحقيقات الدقيقة لم تعط توافقا تاما مع التجربة . ولقد كانت مسألة السويتين $2p_{1/2}$ و $2s_{1/2}$ اللتين يجب أن تتحدا مع بعضهما فى سوية واحدة فى ذرة الهيدروجين ، طبقا لنظرية ديراك ، انظر (20.21) ، موضوعا لدراسات خاصة . واعتبارا من عام ١٩٣٤ بدأ علماء الطيوف يشكون فى صحة هذه النظرية إلا أن أبحاثهم التجريبية كانت بعيدة عن الكمال ، وقد تم التأكد بعد ذلك من صحة المعطيات التجريبية المتعلقة بانزياح السويات بعد قياسها بطريقة الطيوف الاشعاعية ، وقد ظهرت طريقة الطيوف الاشعاعية وتطورت بسرعة فى السنوات الأخيرة نتيجة للتطور الهندسى فى مجالات الهندسة الاشعاعية للأمواج القصيرة* . وقد برزت الآن الطيوف الاشعاعية كفرع متميز فى الفيزياء يعطى معلومات قيمة فى أبحاث النوى والذرات والجزيئات ، كما وتستخدم طرائق الطيوف الاشعاعية هذه فى فيزياء الأجسام الصلبة والسائلة وغيرها . ولقد طبق لامب ورذرفورد ١٩٤٧ طرائق الطيوف الاشعاعية لدراسة وضع السويتين $2p_{1/2}$ و $2s_{1/2}$ كما استفادا من الخاصة المميزة

* يقصد بالاشعاعات ذات التواترات فوق العالية للأمواج القصيرة تلك الاشعاعات التى أطوال موجاتها محصورة بين عدة ملليمترات وعشرات السنتيمترات (MHz $10^{3} - 10^{6}$) أما نجاح الطيوف الاشعاعية فى أبحاث طيوف الذرات فيعود إلى أن البعد بين فرعى السوية المنقسمة ، نتيجة للتأثيرات النسبية والمغزلية والفراغية ، يطابق أطوال الموجات فى مجالات التواترات الاشعاعية .

للسوية $2s_{1/2}$ ، وهى أنها شبه مستقرة ، إذ أن الانتقال منها إلى السوية $1s_{1/2}$ ، الذى ينتج عنه اشعاع ثنائى أقطاب ، هذا الانتقال محظور لأنه لا يحقق قواعد الاختيار (لأن $\Delta l = 0$)* . ان الانتقال من الحالة شبه المستقرة جائز ، أما باصدار فوتونين (ان احتمال مثل هذا الانتقال أصغر بـ 10^8 مرة من الانتقال المسموح) ، أو بانتقال مسبق إلى السوية $2p$ ، وقد بحث رذرفورد ولامب الحالة الثانية . ولندرس بصورة عامة مخطط التجربة (الشكل ٢٠ ـ ٢) . إذ نحصل على حزمة ذرات فى الحالة $1s_{1/2}$ غير المهيجة عن طريق تفكك جزيئات الهيدروجين بالحرارة العالية (فرن التنجستين) ثم تعرض هذه الحزمة لتيار جارف من الالكترونات يهيج قسما صغيرا منها (واحد من مئة مليون تقريبا) حتى تصل إلى الحالة شبه المستقرة $2s_{1/2}$ ومن السهل على هذه المدارات ، خلافا للذرات المستقرة ، أن تعطى طاقتها المهيجة عندما تسقط على هدف (دريئة) معدنى حيث تقتلع منه بعض الالكترونات مما يخلق تيارا الكترونيا يقاس بغلفانومتر حساس ، وإذا تعرضت حزمة الذرات المستقرة إلى الاضطراب الذى يستدعى الانتقال $2s \rightarrow 2p$ فإنها تنتقل فورا بعد ذلك إلى الحالة $1s$ ، دون أن تجد الوقت الكافى لبلوغ الدريئة (الهدف) ، مما ينتج تناقص قياس الغلفانومتر . وقد صممت التجربة بحيث يسبب حقل الاشعاع الانتقالات المذكورة (احتمال الانتقالات الاختيارية صغير جدا) ، وبالاضافة إلى أنه يحدث امتزاز قوى عند تواتر معين ينقطع عنده تيار الهدف حيث يعتبر هذا التواتر ω بمثابة تواتر تجاوبى ويسبب بالتالى الانتقالات الاجبارية التالية $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ ، $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ ، ومن ثم تحدث الانتقالات الخاطفة إلى السوية $1s_{1/2}$ أما الطاقة $\hbar\omega$ فتقابل الفرق بين هاتين الحالتين ، وهكذا

* ويتحقق ذلك للانتقالات المقابلة لاشعاع ثنائيات الاقطاب ، وقد برهنت الحسابات أن الانتقالات المقابلة لاشعاع رباعيات الاقطاب محظورة أيضا بين $1s_{1/2}$ و $2s_{1/2}$.



الشكل ٢٠ ـ ٢ . مخطط تجارب لامب ـ رذرفورد لتبيان انشطار السويتين $2s_{1/2}$ و $2p_{1/2}$.

١ ـ الفرن التنجستينى الذى يصدر حزمة ذرات الهيدروجين ؛ ٢ ـ تيار الالكترونات الصادرة من الذرات المهيجة ؛ ٣ ـ حقل التواترات الاشعاعية ؛ ٤ ـ الدريئة ؛ ٥ ـ مقياس غلفانى .

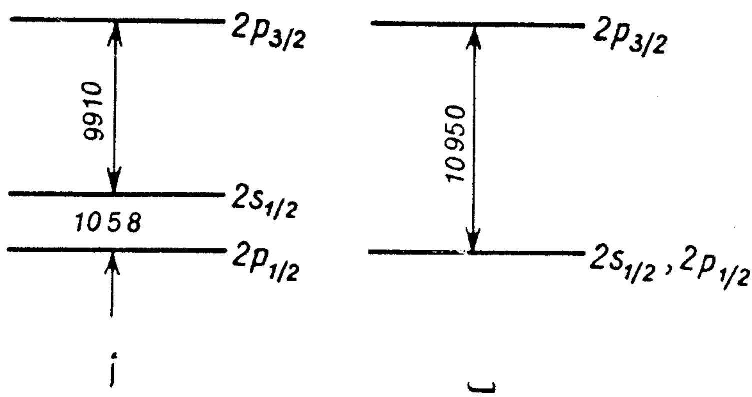
اكتشفت امكانية غاية فى الدقة للقياس النسبى للسويات*

$2s_{1/2}$ و $2p_{1/2}$ و $2p_{3/2}$

ولوحظ من نتائج القياسات أن السوية $2s_{1/2}$ مزاحة نحو الأعلى بمقدار $1/10$ المسافة بين السويتين الثنائيتين $(2p_{3/2}) - (2p_{1/2})$ وهذا ما يساوى $R\frac{\alpha^2}{16}$ وقد مثلت أوضاع سويات ذرة الهيدروجين التى حصل عليها لامب ورذرفورد ، على الشكل ٢٠ ـ ٣ . وللمقارنة رسمنا على الشكل نفسه توضع السويات نفسها ولكنها محسوبة طبقا لنظرية ديراك وقد قدرت المسافات بين السويات بالميغاهرتز . وطبقا للمعطيات الجديدة فإن انزياح السوية $2s_{1/2}$ يساوى تقريبا 1057,86 MHz أو ما يقابل طول موجة 28 cm تقريبا . وقد بدا فيما بعد أن هذا التعارض البسيط بين النظرية والتجربة سيقود إلى تقدم رائع فى التحريك الكهربائى الكوانتى ، انظر البند ٢١ .

---

* لقد ثبتت فى تجارب لامب ورذرفورد موجة التواتر الاشعاعى واختيرت شروط التجارب التى توافق الفرق بين مركبتى زيمان بين السويتين $2s_{1/2}$ و $2p_{1/2}$ و $2p_{3/2}$ ، عن طريق تغيير الحقل المغناطيسى $\mathcal{H}$ ، ثم باستقرار النتائج وجد المؤلفون انزياحا فى السوية من أجل $\mathcal{H} = 0$.



الشكل ٢٠ ـ ٣ . انشطار الحدود فى ذرة الهيدروجين . (أ) المعطيات التجريبية ؛ (ب) معطيات نظرية ديراك (بإهمال الظواهر الفراغية) ، التواترات المقابلة للانتقالات مقدرة بـ MHz .

هـ) البنية فوق الدقيقة لطيف ذرة الهيدروجين . ترتبط البنية فوق الدقيقة للخطوط الطيفية بتفاعل العزم المغناطيسى للنواة مع العزم المغناطيسى للالكترون . وإذا كان لذرة الهيدروجين ($Z = 1$) عزم مغناطيسى $\mu_p = \mu_p \sigma'_p$ (σ'_p ــ هى المصفوفات المغزلية للبروتون) فإن هذه النواة ستخلق حقلا مغناطيسيا اضافيا ، أى أن :

$$A = \operatorname{rot} \frac{\mu_p \sigma'_p}{r}, \quad \mathscr{H} = \operatorname{rot} A \qquad (20.25)$$

وهذا الحقل المغناطيسى للنواة يجب أن يؤثر على العزم المغناطيسى للالكترون $\mu = -\mu_0 \sigma'$ (σ' - هى المصفوفات المغزلية للالكترون)، ويظهر نتيجة لذلك تفاعل اضافى بين النواة والالكترون يؤدى إلى البنية فوق الدقيقة

$$V^{h.f.} = -(\mu \mathscr{H}) = \mu_0 \mu_p \left(\sigma' \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{\sigma'_p}{r} \right) =$$

$$= \mu_0 \mu_p \left((\sigma' \nabla)(\sigma'_p \nabla) \frac{1}{r} - (\sigma' \sigma'_p) \nabla^2 \frac{1}{r} \right) \qquad (20.26)$$

وفى التقريب الأول سنفرض غياب الاتجاهات المميزة ولهذا نجد بالاستفادة من المساواة :

$$(\sigma'\nabla)(\sigma'_p\nabla) = \frac{1}{3}(\sigma'\sigma'_p)\nabla^2 \quad , \quad \nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(r) \qquad (20.27)$$

أن

$$V^{h.f.} = \frac{8\pi}{3}\mu_0\mu_p(\sigma'\sigma'_p)\delta(r) \qquad (20.28)$$

أى أن تفاعل العزوم المغناطيسية ، كالتفاعل التماسى ، يؤثر فقط على الحالة s فى التقريب الأول ، هذا ويمكن حساب العبارة $(\sigma'\sigma'_p)$ الواردة فى الصيغة (20.28) انطلاقا مما يلى :

من السهل تركيب مؤثر المغزل الكلى من مصفوفتى البروتون σ'_p والالكترون σ' لنحصل على المؤثر التالى :

$$S = \frac{\hbar}{2}(\sigma' + \sigma'_p) \qquad (20.29)$$

الذى يكون لمربعه القيمة الخاصة $\hbar^2 S(S+1)$ ، أى أن :

$$S^2 = \frac{1}{4}\left[\sigma'^2 + \sigma'^2_p + 2(\sigma'\sigma'_p)\right] \to S(S+1)$$

ويمكن للقيمة S أن تساوى الصفر (عندما يتعاكس المغزلان) أو الواحد (عندما يتوازيان) ، وباعتبار أن $\sigma'^2 + \sigma'^2_p = 6$ نجد أن :

$$(\sigma'\sigma'_p) \to 2S(S+1) - 3 \qquad (20\ 30)$$

وبما أن التكامل بالتابع ـ δ يساوى :

$$\int \Psi^+\Psi\delta(r)\, d^3x = |\Psi(0)|^2$$

فإننا نحصل على العبارة التى تعطى انزياح السويات ـ s لذرة الهيدروجين (البنية فوق الدقيقة) ، أى أن :

$$\Delta E_S = \frac{8}{3}\mu_0\mu_p\frac{1}{n^3 a_0^3}[2S(S+1) - 3] \qquad (20.31)$$

حيث $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2}$ هو نصف قطر مدار بور الأول أما قيمة $|\Psi(0)|^2$ فقد أخذت من المساواة (20.14) . ويجب تمييز حالتين :

١ ـ مغزلا الالكترون والبروتون متعاكسان ($S = 0$) ، وعندئذ :

$$\Delta E_{S=0} = -8\mu_0\mu_p \frac{1}{n^3 a_0^3} \qquad (20.32)$$

٢ ـ مغزلا الالكترون والبروتون متوازيان ($S = 1$) ، وعندئذ :

$$\Delta E_{S=1} = \frac{8}{3}\mu_0\mu_p \frac{1}{n^3 a_0^3} \qquad (20.33)$$

أما الفرق بين هاتين السويتين فيميز انقسام السوية s الناتج عن تفاعل الالكترون مع الحقل المغناطيسى للنواة ، أى أن :

$$\Delta\omega = \frac{\Delta E_{S=1} - \Delta E_{S=0}}{\hbar} = \frac{32}{3}\frac{\mu_0\mu_p}{\hbar}\frac{1}{n^3 a_0^3} \qquad (20.34)$$

وإذا حسبنا طبقا لهذه العلاقة انقسام السوية s عندما $n = 1$ وذلك بتبديل μ_p بقيمتها المقاسة فى تجربة رابى و μ_0 بمغناطـون بور فاننا نجد :

$$\Delta\omega^{theor} = 1417 \text{ MHz}$$

ومن جهة أخرى فقد برهن التحقيق التجريبى الدقيق لانقسام السويتين المذكورتين المقاس بطريقة* الطيف الاشعاعى أن :

$$\Delta\omega^{exp} = 1420 \text{ MHz}$$

ان أخذ التأثيرات النسبية أو محدودية الكتلة بعين الاعتبار لا يزيد من التواتر النظرى $\Delta\omega^{theor}$ بحيث يصل إلى التواتر المطلوب $\Delta\omega^{exp}$. وكذلك فإن القياس التجريبى للعزم المغناطيسى للبروتون يعتبر فى غاية الدقة ، ولهذا

---

* وهكذا نرى أن طول الموجة الموافقة للانتقال بين أخفض سويتين فى البنية فوق الدقيقة لذرة الهيدروجين يساوى 21,1cm ويلعب طول الموجة هذا دورا كبيرا فى علم الفلك الاشعاعى عند دراسة الكون وبصورة خاصة أمكن قياس توزع كثافة الهيدروجين وسرعته عن طريق التغيير الدوبليرى لتواتر الاشعاع وذلك بواسطة أمواج اشعاعية ذات طول 21,1cm وهذا ما أدى بدوره إلى حساب سرعة دوران المجرةوتدقيق بنية غيوم ماجلان وبنية مجموعات النجوم من مجرتنا ، ولهذا لم يكن غريبا أن كثيرا من المناطيد الاشعاعية مبنى على هذه الموجة ، وكان أول من أشار إلى أهمية الاشعاع هو العالم الفلكى السوفييتى شكلوفسكى .

ولهذا لم يبق لنا لفهم هذا الشذوذ سوى شيء واحد وهو القبول بأن العزم المغناطيسى للالكترون لا يساوى مغناطيون بور وإنما أكبر بقليل . ولكى يتم الحصول على توافق مع التجربة برهن كوشى وفولى بأن العزم المغناطيسى للالكترون يجب أن يكون كما يلى :

$$\mu_{el} = -\mu_0 (1 + \delta) \qquad (20.35)$$

هذا بالاضافة إلى أن :

$$\delta = 0,00116$$

وهكذا نرى أن للالكترون عزما مغناطيسيا شاذا هو $\mu_{el}^{anom} = -\mu_0 \delta$ بالاضافة إلى عزمه المغناطيسى الديراكى (أى الحركى) ، وسنلقى بعض الضوء على طبيعة العزوم المغناطيسية الشاذة فى البند ٢٢ .

و) **ظاهرتا زيمان العادية والشاذة** . لقد درسنا فى البند ١٦ ظاهرة زيمان طبقا لنظرية شرودينجر اللانسبية تلك النظرية التى استطاعت تفسير ظاهرة زيمان العادية وحدها ، أى الانقسام الثلاثى للخطوط الطيفية للذرات الموضوعة فى حقل مغناطيسى ، ولا يمكن بناء النظرية الكاملة لظاهرتى زيمان سواء الشاذة منها (أى الانقسام المتعدد للخطوط الطيفية) أوالعادية (الانقسام الثلاثى) إلا على أساس نظرية ديراك التى لا تحسب فيها التأثيرات النسبية وحدها وإنما التأثيرات المغزلية أيضا ، وبما أن ظاهرة زيمان الشاذة تنجم عن التأثيرات المغزلية فلا تستطيع النظرية الكلاسيكية ولا الميكانيكا الموجية تفسيرها . ويكفى لكتابة معادلة ديراك (19.57) (كأساس لهذه النظرية) فى التقريب النسبى الضعيف الذى تحسب فيه التأثيرات المغزلية . ولنفرض أن الحقل المغناطيسى متجه باتجاه المحور z أى أن : $\mathcal{H}_x = \mathcal{H}_y = 0, \mathcal{H}_z = \mathcal{H}$ عندئذ نجد طبقا لـ (16.4) أن :

$$\frac{P^2}{2m_0} \simeq \frac{p^2}{2m_0} + \frac{e_0}{m_0 c}(Ap) = \frac{p^2}{2m_0} - \mu_0 i \mathcal{H} \frac{\partial}{\partial \varphi} \qquad (20.36)$$

ولهذا نستطيع كتابة المعادلة (19.57) بالشكل :

$$\left(E+\frac{Ze_0^2}{r}-\frac{p^2}{2m_0}\right)\binom{\Psi'_1}{\Psi'_2}=(V^{\text{rel}}+V^{\text{s.-o.}}+V^{\text{cont}}+V^{\text{magn}})\binom{\Psi'_1}{\Psi'_2} \quad (20.37)$$

حيث تعطى الحدود V^{rel} و $V^{\text{s.-o}}$ و V^{cont} بالعلاقات (19.59) و (19.64) و (19.65) على الترتيب وعندئذ يتم توسيطها بالعلاقة :

$$\Delta E_{nl}=\int(\Psi'^*_1\Psi'^*_2)(V^{\text{rel}}+V^{\text{s.-o}}+V^{\text{cont}})\binom{\Psi'_1}{\Psi'_2}d^3x \quad (20.38)$$

وعليه فإننا نحصل على صيغة البنية الدقيقة (20.16) أى أن :

$$\Delta E_{nl}=-R\hbar\frac{Z^4\alpha^2}{n^4}\left(\frac{n}{j+1/2}-\frac{3}{4}\right) \quad (20.39)$$

أما عندما يوجد حقل مُغناطيسى فلا بد أن يظهر تفاعل آخر فى الطرف الأيمن من (20.37) هو التالى :

$$V^{\text{magn.}}=\mu_0\mathscr{H}\left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi}+\sigma'_3\right) \quad (20.40)$$

(σ'_3 - مصفوفة باولى) (16.26) وهذا الحد الأخير يضيف طاقة جديدة للذرة هى التالية :

$$\Delta E^{\text{magn}}=\mu_0\mathscr{H}\int(\Psi'^*_1\Psi'^*_2)\left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi}+\sigma'_3\right)\binom{\Psi'_1}{\Psi'_2}d^3x. \quad (20.41)$$

ويلاحظ أن العلاقة بين الطاقات الاضافية تحدد بوضوح فيما إذا كانت ظاهرة زيمان شاذة (حالة الحقل المغناطيسى الضعيف) أو عادية (حالة الحقل المغناطيسى القوى) . ولنفترض أن الحقل المغناطيسى ضعيف نسبيا ، بحيث يكون تفاعل الالكترونات الذرية معه أقل من التفاعل النسبى أو أقل من التفاعل المغزلى المدارى ، وعندئذ يجب أن نأخذ التابع الموجى (20.2) الذى حصلنا عليه عند أخذ الرابطة المغزلية - المدارية بعين الاعتبار ، وبوضع هذا التابع فى (20.41) نحصل على الطاقة الاضافية التالية:

$$\Delta E^{\text{magn}}=\mu_0\mathscr{H}\int_0^\infty|R_{nl}|^2r^2\,dr\oint\left(Y^{(l)}_{lm}\right)^+\left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi}+\sigma'_3\right)Y^{(l)}_{lm}\,d\Omega \quad (20.42)$$

مع ملاحظة أن التكامل بـ r فى المساواة الأخيرة يجب أن يساوى الواحد :

$$\int_0^\infty |R_{nl}|^2 r^2 dr = 1$$

وبتعويض السبينورات الكروية بقيمها من (19.24) و (19.25) ثم اعتبار شروط المعايرة للتوابع الكروية نجد أن :

$$\oint (Y_l^m)^* (Y_l^m)\, d\Omega = 1$$

ونحصل عندما $j = l + 1/2$ على العبارة التالية :

$$\Delta E^{\text{magn}} = \frac{\mu_0 \mathscr{H}}{2l+1}[(l+m)m + (l+1-m)(m-1)] =$$
$$= \mu_0 \mathscr{H}(m - 1/2)\frac{2(l+1)}{2l+1}$$

وبنفس الطريقة تماما نجد من أجل $j = l - 1/2$ ما يلى :

$$\Delta E^{\text{magn}} = \frac{\mu_0 \mathscr{H}}{2l+1}[(l-m+1)m + (l+m)(m-1)] =$$
$$= \mu_0 \mathscr{H}(m - 1/2)\frac{2l}{2l+1}.$$

ومنه نجد باعتبار أن $m_j = m - 1/2$ أنه يمكن دمج العلاقتين السابقتين بعلاقة واحدة :

$$\Delta E^{\text{magn}} = \mu_0 \mathscr{H} g m_j = o\hbar g m_j \qquad (20.43)$$

حيث $o = \frac{e_0 \mathscr{H}}{2m_0 c}$ **تواتر التأرجح اللارمورى أما g معامل لاندى الذى** يساوى :

$$g = \frac{j + 1/2}{l + 1/2}. \qquad (20.44)$$

وهكذا نلاحظ ظهور معامل لاندى فى الطاقة الاضافية فى حالة ظاهرة زيمان الشاذة ، هذا المعامل الذى يساوى الواحد ، انظر (16.10) ، فى حالة ظاهرة زيمان العادية ولا يؤدى ظهور هذه الطاقة إلى الانقسام الثلاثى (ظاهرة زيمان العادية) وإنما إلى انقسام أكثر تعقيدا (ظاهرة زيمان

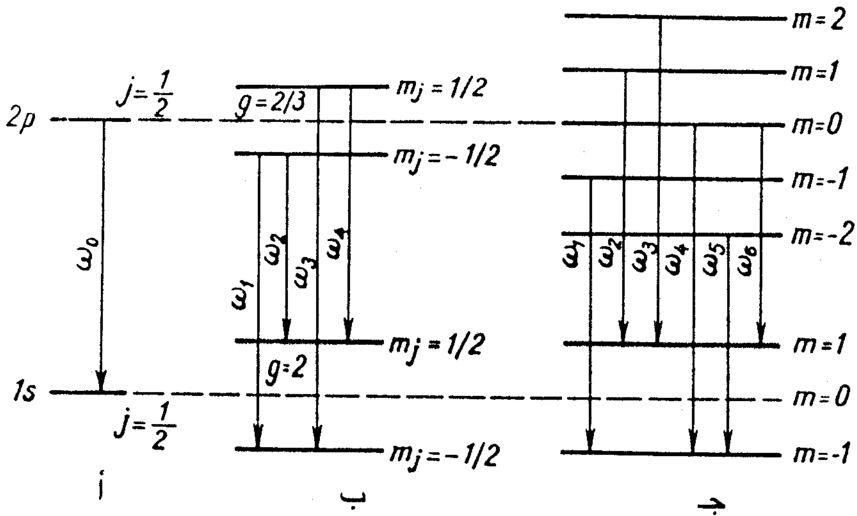
الشاذة) . وبما أنه يمكن لـ m_j أن تأخذ $2j + 1$ قيمة مختلفة فإن كل سوية تنتج بسبب ظاهرة زيمان الشاذة ستنقسم إلى $2j + 1$ سوية جزئية أى أن الحقل المغناطيسى يلغى الانطباق كليا حتى ولو كان هذا الانطباق محسوبا طبقا للنظرية النسبية لذرة الهيدروجين ، وللحصول على وصف دقيق لهذا الانقسام لا بد من حساب معامل لاندى الذى يساوى 2 للحالة $s_{1/2}$ و $2/3$ للحالة $p_{1/2}$ و $4/3$ للحالة $p_{3/2}$ . . . إلى آخره . ويجب أيضا معرفة قواعد الاختيار بالعدد الكوانتى m_j ، وفى الحالة الخاصة عندما $\Delta m_j = 0$ نحصل على مركبتين (جزئيتين) مستقطبتين باتجاه متواز (أى أنهما توازى الحقل المغناطيسى) ، أما عندما $\Delta m_j = \pm 1$ نجد مركبتين مستقطبتين باتجاه يتعامد مع الحقل المغناطيسى ، ويتم حساب التواتر الاشعاعى الناتج طبقا للعلاقة (20.43) حيث نجد :

$$\omega = \omega_0 + o\,(g^0 m_j^0 - g m_j) \qquad (20.45)$$

حيث ω_0 هو تواتر الاشعاع بغياب الحقل المغناطيسى ($\mathcal{H} = 0$) أما g^0 و g فهما معاملا لاندى للحالتين البدائية والنهائية وأما العدد الكوانتى المغناطيسى m_j للحالة النهائية فيمكن أن يأخذ القيم $m_j^0 = m_j^0$ و $m_j^0 \pm 1$
ويوضح الشكل ٢٠ ـ ٤ انقسام السويات الطيفية $1^2 s_{1/2}$ و $2^2 p_{1/2}$ فى حقل مغناطيسى ضعيف ، وقد استخدمنا تواتر لارمور كوحدة للانقسام ، ويتبين من الشكل ٢٠ ـ ٤ ب ، أننا لن نجد فى هذه الحالة ثلاثة خطوط (كما فى حالة ظاهرة زيمان العادية) بل أربعة مزاحة يتعين انزياحها من العلاقة (20.45) ، ومن السهل أن نجد $g^0 = 2/3 , g = 2$ فى حالة الحقل الضعيف ومنه :

$$\begin{aligned} \Delta\omega_1 &= \omega_1 - \omega_0 = {}^2/_3\, o, & \Delta\omega_2 &= -\,{}^4/_3\, o \\ \Delta\omega_3 &= {}^4/_3\, o, & \Delta\omega_4 &= -\,{}^2/_3\, o \end{aligned} \qquad (20.46)$$

وتطبق العلاقة (20.44) الخاصة بمضروب لاندى على ذرة الهيدروجين ،



الشكل ٢٠ ـ ٤ . ظاهرة زيمان : (أ) موقع السويات بغياب الحقل ؛ (ب) ظاهرة زيمان الشاذة ؛ (جـ) ظاهرة زيمان العادية .

على كل الذرات التى لها الكترون تكافؤ واحد ، أما فى الحالة العامة فإن مضروب لاندى يعطى بالعلاقة :

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \qquad (20.47)$$

حيث J و S و L هى العزوم المدارية والمغزلية والكلية على الترتيب بالاضافة إلى أن $J = |L - S|, |L - S + 1|, \ldots, L + S - 1, L + S$ وكحالة خاصة نجد بالنسبة لعناصر المجموعة الأولى $(J = j,\ L = l,$ $s = \frac{1}{2})$ ان الصيغتين (20.47) و (20.44) تتطابقان وفى الحالة s عندما $(l = 0, j = s = \frac{1}{2})$ يأخذ معامل لاندى قيمة عظمى و هى :

(20.48)

أما بالنسبة للذرات التى لها الكترونان على الغمامة الخارجية (كذرة الهليوم مثلا) ، فيمكن أن نجد بجانب الحالة الثلاثية $(S = 1)$ خطوط أحادية

$(S = 0, J = L)$ وهنا يجب أن تنعدم التأثيرات المغزلية ، ولهذا يجب أن نلاحظ ظاهرة زيمان العادية .

ز) الحقول المغناطيسية القوية . ظاهرة باشن - باك . نلاحظ ظاهرة زيمان الشاذة فى حالة الحقول الضعيفة عندما لا يستطيع الحقل الخارجى أن يتغلب على الرابطة المغزلية - المدارية ، وهذا يعنى ، رياضيا أن الحد $\Delta E^{magn} \sim \mu_0 \mathcal{H}$ ، انظر (20.43) ، سيكون أصغر بكثير من انقسام الخطوط الطبيعى التالى :

$$\Delta E^{s.-o.} \sim | E_{nlj} - E_{nlj'} | \sim \frac{RhZ^4\alpha^2}{n^3}$$

المعين بالعلاقة (20.39) أى أن :

$$\Delta E^{s.-o.} \gg \Delta E^{magn} \qquad (20.49)$$

وينبغى فى هذه الحالة حل المسألة دون اهمال التأثير المغزلى - المدارى ثم اقامة العلاقة بين التوابع الكروية التى تتألف منها السبينورات الكروية وحساب الطاقة الاضافية التى تؤدى إلى ظاهرة زيمان الشاذة لأن المعامل g لا يساوى الصفر . أما فى حالة الحقول القوية عندما (على عكس الضعيفة) يكون الانقسام الناتج عن الحقل المغناطيسى الخارجى أكبر من ذلك الناتج عن التفاعل المدارى - المغزلى أى

$$\Delta E^{magn} \gg \Delta E^{s.-o.} \qquad (20.49a)$$

فإن الحقل المغناطيسى « يحطم » الرابطة المغزلية - المدارية ، وبناء عليه لن يتواجد حل فى التقريب الصفرى بدلالة السبينورات الكروية ، انظر (19.24) و (19.25) ، وعندئذ نستطيع اهمال التفاعلات V^{rel} و $V^{s.-o.}$ و V^{cont} ، ولهذا تأخذ المعادلة الشكل التالى :

$$\left(E + \frac{Ze_0^2}{r} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0}\right)\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} = \mu_0 \mathcal{H}\left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \sigma_3'\right)\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} \qquad (20.50)$$

وبما أن المتحولات المغزلية والاحداثية منفصلة فى (20.50) فيمكن البحث عن حل من الشكل ، انظر (16.37) ، التالى :

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \psi_{nlm_{1,2}}(r) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \qquad (20.51)$$

حيث يكون القسم الاحداثى من التابع الموجى :

$$\psi_{nlm_{1,2}}(r) = R_{nl}(r)\, Y_l^{m_{1,2}}(\vartheta, \varphi)$$

حلا لمعادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين وهو يصف الحالة المضطربة لذرة ذات طاقة تساوى :

$$E_n^0 = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \qquad (20.52)$$

وذات قيمة معينة للعزم الحركى تساوى $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ ولمسقطه على المحور z تساوى $\hbar m_{1,2}$. ولكى يحقق التابع الموجى Ψ المعادلة (20.50) يجب أن يكون قسمه المغزلى تابعا خاصا لمؤثر مسقط المغزل S_z على اتجاه الحقل المغناطيسى . وطبقا لـ (16.47) تمثل التوابع المغزلية الخاصة بالعمودين $C(m_s)$ التاليين :

$$C(1/2) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad m_s = 1/2 \quad , \quad C(-1/2) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad m_s = -1/2 \qquad (20.53)$$

ويوافق الحل ($C(1/2$) توجه المغزل باتجاه الحقل المغناطيسى ($m_s = 1/2$) بينما الحل الثانى توجه المغزل بعكس الحقل ($m_s = -1/2$) وهكذا يجب أن يكتب التابع الموجى الكلى للمعادلة (20.50) بالشكل التالى :

$$\Psi_{nlm_{1,2}m_s} = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = R_{nl} Y_l^{m_{1,2}} C(m_s) \qquad (20.54)$$

وعندئذ تتعين سويات طاقة الذرة فى حقل مغناطيسى بالعبارة :

$$E = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} + \mu_0 \mathscr{H} (m_{1,2} + 2m_s) \qquad (20.55)$$

حيث يأخذ العدد الكوانتى المغناطيسى $m_{1,2}$ القيم التالية :

$$m_{1,2} = -l, \; -l+1, \; \ldots, \; l-1, \; l$$

أما العدد الكوانتى المغزلى m_s فيساوى $\pm 1/2$. وكما يبدو من (20.55) ان تطبيق الحقل المغناطيسى يؤدى إلى انقسام السوية E^0_n إلى مجموعتين من السويات الجزئية ، تقابل الأولى قيمة لـ m_s تساوى $1/2$. أى أن $\Delta E^{magn} = \mu \mathcal{H} (m_1 - 1)$ أما الثانية فتقابل قيمة لـ $m_s = 1/2$ أى أن :

$$\Delta E^{magn} = \mu_0 \mathcal{H} (m_2 + 1)$$

فإذا رمزنا للمقدار $m_{1,2} + 2m_s$ بعدد كوانتى واحد m فيمكن كتابة الطاقة بالشكل :

$$E_{n,m} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} + \mu_0 \mathcal{H} m$$

حيث $m = m_{1,2} + 2m_s$. ونلاحظ أن العدد الكوانتى m يمكن أن يأخذ $2l + 3$ قيمة :

$$-(l+1) \leqslant m \leqslant l+1$$

اى أن السوية E^0_n تنقسم إلى $2l + 3$ سوية جزئية (ظاهرة باشن ـ باك) ، ويبين الشكل (٢٠ ـ ٤ ، ج) انقسام السوية $2p$ لذرة الهيدروجين ، ويبدو أن السوية $2p$ التى تقابل $m = 0$ ثنائية الانطباق ويتعين تابعها الموجى بالتركيب :

$$\Psi_{nl} = C_1 R_{21} Y_1^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + C_2 R_{21} Y_1^{1} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (20.57)$$

مع تحقق الشرط :

$$C_1^2 + C_2^2 = 1$$

ونلاحظ أن الحالة $1s$ التى تقابل $m = 0$ هى حالة محظورة .

ولندرس الانتقالات المسببة للاشعاع بين سويات الذرة ، إذ يمكن ، بتقريب جيد ، اعتبار أنها تحدث دون تغيير العدد الكوانتى المغزلى $\Delta m_s = 0$. وفى الحقيقة لا بد لتغيير هذا العدد من حدوث تفاعل بين حقل الاشعاع والعزم المغزلى للالكترون المتناسب مع مصفوفات باولى ، وهذا التفاعل صغير جدا بالمقارنة مع التفاعل الثنائى الاستقطاب العادى ومن

المعلوم أن قواعد الاختيار بالعدد الكوانتى المغناطيسى هى $\Delta m_{1,2} = 0, \pm 1$.
وإذا أخذنا قواعد الاختيار المشار إليها بعين الاعتبار نرى أن الانتقالات بين السويات تترافق باشعاع يعطى ثلاثة انقسامات فى التواترات :

$$\Delta\omega = o\Delta m; \quad \Delta m = 0, \ \pm 1 \qquad (20.58)$$

حيث :

$$o = \mu_0 \mathscr{H}/\hbar = e_0 \mathscr{H}/2m_0 c \qquad (20.59)$$

وهكذا نرى أن ظاهرة زيمان الشاذة تتحول إلى ظاهرة زيمان العادية فى الحقول القوية ، انظر (20.49a) ، أى أننا نحصل على ثلاثة انقسامات بدلا من أربعة ، وعندئذ يبدو من الشكل (٢٠ ـ ٤ ، جـ) وبملاحظة أن $\Delta m = 0, \pm 1$ يتعين الانقسام الثلاثى ، كما فى نظرية شرودينجر ، انظر (البند ١٦) ، بالعلاقة :

$$\begin{gathered} \Delta\omega_1 = \Delta\omega_2 = \omega_1 - \omega_0 = 0, \quad \Delta\omega_3 = \Delta\omega_4 = \omega_3 - \omega_0 = o \\ \Delta\omega_5 = \Delta\omega_6 = \omega_5 - \omega_0 = -o \end{gathered} \qquad (20.60)$$

ومن الممكن شلكيا الحصول على ظاهرة زيمان العادية من الشكل (20.4.b) ، أى من الظاهرة الشاذة إذا جعلنا $g = 1$. ويصبح الانقسام الزيمانى أكثر تعقيدا فى الحالات الخاصة عندما يكون $\Delta E^{s.-o.} < \Delta E^{magn}$ لأحد السويات الطاقوية $\Delta E^{s.-o.} > \Delta E^{magn}$ لسوية أخرى أو عندما يكون لكل من السويتين نفس المرتبة ولن نتطرق إلى هذه الحالات الخاصة المعقدة باعتبار أنها تخرج عن نطاق هذا الكتاب .

البند ٢١ ـ انزياح السويات اللامبى

أ) **الفراغ (التخلخل) الكهرطيسى** . عندما يتحرك الالكترون فى الذرة فإنه لا يتفاعل مع النواة الذرية فقط وإنما مع التذبذبات الصفرية للحقل الكهرطيسى الحر ، أى مع الفراغ الكهرطيسى ، وفى الحقيقة استنادا إلى

ما رأيناه فى البند ٩ لا تنعدم تقلبات الحقل المغناطيسى حتى بغياب الفوتونات الحقيقية أى عندما $N_{k\lambda} = 0$ ، أى أن التفاعل مع الفراغ المذكور يؤدى إلى « ارتجاف » الالكترون على مداره ونتيجة لذلك يتموه الالكترون فى الفراغ مما يغير من تأثيره على النواة ، فيقل تجاذبه معها وترتفع سويات الطاقة للحالات الراسخة . وترتكز نظرية انزياح السويات الذرية على تأثير الفراغ الكهرطيسى على التكميم الثانى للحقل الكهرطيسى ، وبما أن الحسابات اللازمة لذلك فى غاية التعقيد ، فإننا سنكتفى بنظرية نصف كلاسيكية لا نسبية تصف حركة الالكترون تحت تأثير التقلبات الصفرية للفراغ وهى النظرية التى اقترحها الفيزيائى ويلتون .

ب) طريقة ويلتون . لنحسب تفاعل الفراغ الكهرطيسى مع الالكترون بواسطة المعادلة الكلاسيكية العامة

$$m_0 \delta \ddot{r} = e\mathscr{E}_{vac} + \frac{e}{c}\left[\delta \dot{r}\, \mathscr{H}_{vac}\right] \approx e\mathscr{E}_{vac} \qquad (21.1)$$

حيث δr ـ انحراف الالكترون عن مداره التوازنى فى الذرة و $\mathscr{E}_{vac}$ ـ الحقل الفراغى ، ونلاحظ أننا فى التقريب اللانسبى أهملنا الحد الثانى والطرف الأيمن الذى يحتوى على الحقل المغناطيسى $\mathscr{H}_{vac}$ والمتناسب مع $(|\delta \dot{r}|/c) \ll 1$. ولننشر شدة الحقل المغناطيسى فى سلسلة فورير (فورييه) :

$$\mathscr{E}_{vac} = \sum_{k,\lambda} \mathscr{E}_{k\lambda} \cos\left(\omega_{k\lambda} t - kr\right) \approx \sum_{k,\lambda} \mathscr{E}_{k\lambda} \cos \omega_{k\lambda} t \qquad (21.2)$$

حيث $\omega_{k\lambda} = kc$ ، أما تابعية الاحداثيات فيمكن اهمالها لأن $kr \ll 1$ (سنبرهن بعد قليل أن هذه الفرضية صحيحة) ، ويقابل كل توافقى k نوعى استقطاب $\lambda = 1, 2$.ولنعوض (21.2) فى (21.1) ثم نستكمل فنجد انزياح احداثيات الالكترون تحت تأثير الحقل الفراغى ، أى أن :

$$\delta r = -\frac{e}{m_0} \sum_{k,\lambda} \mathscr{E}_{k\lambda} \frac{\cos \omega_{k\lambda} t}{\omega_{k\lambda}^2} \qquad (21.3)$$

أما متوسط مربع الانزياح فيكون :

$$\overline{(\delta r)^2} = \frac{e^2}{2m_0^2} \sum_{k,\lambda} (\mathscr{E}_{k\lambda})^2/\omega_{k\lambda}^4 \qquad (21.4)$$

لأن :

$$\overline{\cos \omega t \cos \omega' t} = \frac{1}{2} \delta_{\omega\omega'}.$$

وعندئذ يكون $\overline{\delta r} = 0$ لأن $\overline{\cos \omega t} = 0$ ولنذكّر أن طاقة الاهتزاز الصفرى طبقا لـ (9.53) تساوى :

$$E = \frac{1}{4\pi} \int \mathscr{E}_{\text{vac}}^2 d^3x = \sum_{k,\lambda} \frac{1}{2} \hbar \omega_{k\lambda} \qquad (21.5)$$

وبتبديل النشر (21.2) من هذه العلاقة مع الاحتفاظ بتابعية r واعتبار أن :

$$\frac{1}{L^3} \int e^{i(k-k')r} d^3x = \delta_{kk'}$$

نجد بعد استكمال (21.5) فى كل الفراغ أن :

$$\frac{L^3}{8\pi} \sum_{k,\lambda} \mathscr{E}_{k\lambda}^2 = \sum_{k,\lambda} \frac{1}{2} \hbar \omega_{k\lambda} \qquad (21.6)$$

أى أن مربع مركبة فورييه للحقل الفراغى تساوى :

$$\mathscr{E}_{k\lambda}^2 = \frac{4\pi}{L^3} \hbar \omega_k \qquad (21.7)$$

ويمكن استخدام هذه العلاقة الآن لحساب متوسط مربع الانزياح (21.4) فنجد أن :

$$\overline{(\delta r)^2} = \frac{2\pi e^2 \hbar}{L^3 m_0^2} \sum_{k,\lambda} \frac{1}{\omega_{k\lambda}^3} \qquad (21.8)$$

وبتغيير المجموع فى العلاقة الأخيرة إلى تكامل بالتواترات $\omega_{k\lambda} = kc$ بواسطة العلاقة التالية :

$$\frac{1}{L^3} \sum_{k,\lambda} = 2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k = \frac{2}{c^3 (2\pi)^3} \int \omega^2 \, d\omega \, d\Omega = \frac{1}{c^3 \pi^2} \int \omega^2 \, d\omega \qquad (21.9)$$

حيث اعتبرنا أن التواتر ω لا يتعلق بالاستقطاب $\lambda = 1, 2$ وأن التكامل بالزاوية المجسمة Ω يساوى 4π بسبب التناظر الكروى ، وهكذا نحصل لحساب $\overline{(\delta r)^2}$ على التكامل التالى :

$$\overline{(\delta r)^2} = \frac{2}{\pi}\frac{e^2}{\hbar c}\left(\frac{\hbar}{m_0 c}\right)^2 \int \frac{d\omega}{\omega} \qquad (21.10)$$

ويمكن عزل القسم المتقارب إذا اعتبرنا أن حركة الالكترون لانسبية ، وهذا يعنى أن الاندفاع الذى يكتسبه الالكترون عند « ارتجافه » بتأثير الحقل الفراغى لا يمكن أن يتجاوز m_0c أى $hk < m_0c$ ومن هنا ينتج الحد الأعلى للتكامل :

$$\omega < \omega_{max} \approx \frac{m_0 c^2}{\hbar} \qquad (21.11)$$

ولنحصل على الحد الأدنى ω_{min} بشرط أن لا يقل تواتر « ارتجاف » الالكترون عن التواتر المقابل لطاقة ارتباط الالكترون فى الذرة :

$$\omega > \omega_{min} = \frac{|E|}{\hbar} = \frac{Z^2 e^4 m_0}{2n^2 \hbar^3} \qquad (21.12)$$

حيث Z شحنة النواة ، وإذا وضعنا الحدين (21.11) و (21.12) فى التكامل (21.10) فإننا نجد أن :

$$\overline{(\delta r)^2} = \frac{2}{\pi}\alpha\left(\frac{\hbar}{m_0 c}\right)^2 \ln\frac{2n^2}{(Z\alpha)^2} \qquad (21.13)$$

حيث $\alpha = e_0^2/\hbar c = 1/137$ هو ثابت البنية الدقيقة* ويؤدى الاهتزاز الفراغى ، كما يتضح من العلاقة الأخيرة ، إلى بعض الانتشار (التموه) لنقطية الالكترون ، هذا بالاضافة إلى أن أبعاد الفراغ ، حيث ينتشر الالكترون ، تحسب كمتوسط هندسى بين نصف القطر الكلاسيكى للالكترون وطول موجته كومبتون : $\lambda = h / m_0c$ أى أن :

$$r_{vac} = \sqrt{\overline{(\delta r)^2}} \sim \sqrt{\alpha}\,\frac{\hbar}{m_0 c} = \sqrt{\frac{e^2}{m_0 c^2}\,\frac{\hbar}{m_0 c}} \qquad (21.14)$$

وعندئذ تكون القيمة ... التى أهملناها فى المساواة (21.2) من المرتبة

* نلاحظ أنه يمكن حساب تغير التواترات ω_{min} و ω_{max} بشكل أدق فى نظرية التنظيم (الضبط) ، وبما أن مقدار الانزياح (21.13) يتبع لوغاريتميا ω_{min} و ω_{max} فإن الخطأ فى حسابهما ، طبقا لحساباتنا التقريبية ، ضئيل .

$(m_0c/\hbar)\, r_{vac} \sim \sqrt{\alpha} \ll 1$ ونتيجة لانتشار الالكترون فإن تفاعله مع النواة يتغير وبدلا من العبارة العادية التالية :

$$V = -e_0\Phi(\boldsymbol{r}) \qquad (e_0 = -e > 0) \qquad (21.15)$$

فإننا نجد العبارة التالية :

$$V + \delta V_{vac} = -e_0\Phi(\boldsymbol{r}+\delta\boldsymbol{r}) = -e_0\left[1 + (\delta\boldsymbol{r}\nabla) + \frac{1}{2}(\delta\boldsymbol{r}\nabla)^2 + \ldots\right]\Phi(\boldsymbol{r})$$

لنوسط هذه العبارة على مجال « ارتجاف » الالكترون مع ملاحظة العلاقة :

$$\overline{\delta\boldsymbol{r}} = 0, \quad \overline{(\delta x)^2} = \overline{(\delta y)^2} = \overline{(\delta z)^2} = \frac{1}{3}\,\overline{(\delta\boldsymbol{r})^2}$$

وعندئذ يكون :

$$\overline{(\delta\boldsymbol{r}\nabla)^2} = \frac{1}{3}\,\overline{(\delta\boldsymbol{r})^2}\nabla^2 \qquad (21.17)$$

وبالتالى فإن التفاعل الاضافى للالكترون مع الذرة نتيجة للاهتزاز الفراغى يساوى :

$$\delta V_{vac} = -\frac{e_0^2}{6}\,\overline{(\delta\boldsymbol{r})^2}\nabla^2\Phi = \frac{4}{3}\, Ze_0^2\alpha\left(\frac{\hbar}{m_0c}\right)^2 \times \ln\frac{2n^2}{(Z\alpha)^2}\,\delta(\boldsymbol{r}) \qquad (21.18)$$

وقد حصلنا على المساواة الأخيرة باعتبار أن الحقل الكولونى لنواة ذرة الهيدروجين يحقق معادلة بواسون

$$\nabla^2\Phi = -4\pi Ze_0\delta(\boldsymbol{r}) \qquad (21.19)$$

ولحساب العبارة النهائية لانزياح السويات فى ذرة الهيدروجين من الضرورى توسيط المقدار δV_{vac} بحالة الذرة المقابلة $\psi(r)$ وعندئذ تأخذ عبارة الانزياح الشكل التالى :

$$\delta E_{vac} = \int \psi^*(\boldsymbol{r})\,\delta V_{vac}\,\psi(\boldsymbol{r})\,d^3x = \frac{4}{3}\, Ze_0^2\alpha \times \left(\frac{\hbar}{m_0c}\right)^2 |\psi(0)|^2 \ln\frac{2n^2}{(Z\alpha)^2} \qquad (21.20)$$

أى أن الانزياح السابق ، الذى سمّى بالانزياح اللامبى ، يتعين بمعرفة قيمة التابع الموجى فى مركز الاحداثيات ، وهذا لا يحدث إلا فى الحالات s ، أما فى الحالات الأخرى ($l = 1, 2, \ldots$) فينعدم المقدار $|\psi(0)|^2$ فى التقريب

المدروس ، وإذا حسبنا هذا المقدار فى الحالات s ، انظر (12.40) ، فإننا نجد :

$$|\psi(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi n^3 a_0^3} \qquad (21.21)$$

حيث $a_0 = \hbar^2/m_0 e_0^2$ هو نصف قطر بور و n هو العدد الكوانتى الرئيسى ، وبتعويض هذه النتيجة فى (21.20) نجد لحساب الانزياح الصيغة التالية :

$$\delta E_{vac} = \frac{8}{3\pi} \alpha^3 \frac{Z^4}{n^3} R\hbar \ln \frac{2n^2}{(Z\alpha)^2} \qquad (21.22)$$

وهى العلاقة التى استنتجها لأول مرة بيتى ١٩٤٧ أما R فهو ثابت ريدبرغ فى العلاقة السابقة $R = m_0 e_0^4/2\hbar^3$. ويبدو مما سبق أن انزياح لامب لذرة الهيدروجين ، إذا حسب بالنسبة لطاقة السويات المتهجية ، يساوى

$$\frac{\delta E_{vac}}{|E|} \sim \frac{\alpha^3 Z^4 R\hbar}{R\hbar Z^2} = \alpha^3 Z^2 \qquad (21.23)$$

أما إذا قورن انزياح لامب بانقسام السويات ΔE_{nj} المقابل ، للبنية الدقيقة والذى هو من رتبة $R\hbar Z^4 \alpha^2$ ، فإننا نجده أصغر بـ α مرة . لندرس الحالتين $2s_{1/2}$ ، $2p_{1/2}$ فى ذرة الهيدروجين ($Z = 1$) ، لأن لهاتين السويتين نفس الطاقة حتى إذا اعتبرنا البنية الدقيقة ، ونفس العدد الكوانتى $j = 1/2$. فيما يؤدى التفاعل الفراغى إلى انزياح السوية $2s_{1/2}$ وهذا ما يؤدى إلى توضع السوية $2s_{1/2}$ فوق السوية $2p_{1/2}$ ، وبالفعل فقد أظهرت تجارب لامب ورذرفورد سنة ١٩٤٧ صحة ذلك ، انظر البند ٢٠ ، إذ تتوافق بشكل جيد القيمة العددية المحسوبة بالعلاقة (21.22) للحالة $2s$ ($n = 2$) :

$$\delta E_{vac} = 17{,}8R = 1040 \text{ MHz} \qquad (21.24)$$

مع المعطيات التجربية لانزياح لامب للسويات

$$\sigma E = 1057{,}86 \text{MHz}$$

ونلاحظ أن الدراسات الكاملة لانزياح السويات الالكترونى الذرى التى تستند على الميكانيكا الكوانتية النسبية تعطى توافقا عدديا مع التجربة بشكل أفضل بكثير من الصيغة الكلاسيكية (21.22) فيما يكون الاختلاف بين التجربة والنظرية أقل من 10^{-3}MHz .

البند ٢٢ - الحل الكامل لمعادلة ديراك

سندرس فى هذه الفقرة بالتفصيل الحل الكامل لمعادلة ديراك ، آخذين بعين الاعتبار الحلول ذات الطاقة الموجبة والسالبة على حد سواء ، وبهذه المناسبة نلاحظ أن دراسة الحلول ذات الطاقة السالبة أدت إلى فرضية وجود البوزيترون ، أى اكتشاف الخاصة الرئيسية للجسيمات الأساسية ألا وهى وجودها وامكانية تحول بعضها إلى آخر .

أ) حل معادلة ديراك للجسيم بوجود الطاقات الموجبة والسالبة .

لندرس أولا معادلة ديراك للجسيم الحر ، أى أن :

$$\left(-\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial t} - \mathrm{H}\right)\psi = 0 \qquad (22.1)$$

حيث يعطى الهاملتونيان بالعلاقة التالية :

$$\mathrm{H} = \frac{hc}{i}(\alpha\nabla) + \rho_3 m_0 c^2 \qquad (22.2)$$

ويمكن دراسة الحركة الحرة كحالة خاصة من الحركة تحت تأثير قوى مركزية متناظرة ولهذا يجب أن يتحقق قانون مصونية العزم الكلى ، انظر (19.4) ، أى أن :

$$\mathbf{J} = [\boldsymbol{r}\mathbf{p}] + \frac{1}{2}h\sigma = \mathrm{const} \qquad (22.3)$$

وهذا يعنى ، فى لغة الميكانيكا الكوانتية ، أن العزم الحركى الكلى يجب أن يتبادل مع الهاملتونيان . ويمكن أن نتخلص من العزم المدارى $[\boldsymbol{r}\mathbf{p}]$ إذ أخذنا مسقط العزم الكلى على اتجاه الاندفاع ، لأن مسقط العزم المدارى على اتجاه الاندفاع يساوى الصفر ، أى أن :

$$(\mathbf{p}[\boldsymbol{r}\mathbf{p}]) = \mathrm{p}_x(y\mathrm{p}_z - z\mathrm{p}_y) + \mathrm{p}_y(z\mathrm{p}_x - x\mathrm{p}_z) + \mathrm{p}_z(x\mathrm{p}_y - y\mathrm{p}_x) = 0$$

ولاجراء الحسابات اللاحقة من الأفضل استخدام مؤثر عزم كمية الحركة على اتجاه الاندفاع بوحدات ($^1/_2\hbar$) ، أى أن :

$$S = 2\frac{(\mathrm{Jp})}{\hbar \mathrm{p}} = \frac{(\sigma\nabla)}{\sqrt{\nabla^2}} = \frac{(\sigma\nabla)}{ik} \qquad (22.4)$$

حيث $p = \hbar k$ هو الاندفاع . أما القيمة الخاصة للمؤثر ∇^2 فتساوى $-k^2$ ومن الواضح أن هذا المؤثر يتبادل مع الهاملتونيان (22.2) ، وليس من الصعب التحقق من ذلك بالحساب المباشر للمقدار $HS - SH = 0$ ، ولنبحث عن الحل الخاص لمعادلة ديراك بالشكل التالى :

$$\psi(k) = \frac{1}{L^{3/2}} be^{-ic\varepsilon Kt + ikr} \qquad (22.5)$$

حيث :

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} \qquad (22.6)$$

هى مصفوفة رباعية الاسطر و L^3 هوحجم متوازى السطوح ، أما مركبات المتجـــه الموجـــى $k(k_1, k_2, k_3)$ فترتبـــط مـــع الأعـــداد. $n_1, n_2, n_3 = 0 \pm 1, \pm 2, \pm 3, ...$ ، بالعلاقات $k_1 = \frac{2\pi}{L} n_1$ (انظر فقرة البند ٤ ، حل معادلة شرودينجر فى حالة الحركة الحرة)أما الطاقة E فيرتبط مع المقدار $K = \sqrt{k^2 + k_0^2}$ بالعلاقة الآتية :

$$E = c\hbar \varepsilon K, \qquad (22.7)$$

حيث $k = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}$ و $k_0 = \frac{m_0 c}{\hbar}$. هذا بالاضافة إلى أن الوسيط ε لم يعين بعد ، فإذا لاحظنا تبادل المؤثر S مع الهاملتونيان (22.2) فإنه يمكن فرض شرط جديد على التابع الموجى ، أو :

$$\frac{(\sigma\nabla)}{ik}\psi(k) = s\psi(k) \qquad (22.8)$$

حيث s القيمة الخاصة للمؤثر (22.4) ، وبتبديل التابع الموجى (22.5) فى المعادلة (22.8) و (22.1) نجد لحساب المصفوفة b المعادلتين التاليتين :

$$(ks - (\sigma k))\, b = 0 \qquad (22.9)$$

$$(\varepsilon K - s\rho_1 k - \rho_3 k_0)\, b = 0 \qquad (22.10)$$

وإذا أخذنا بعين الاعتبار المصفوفات σ_n و ρ_n المعطاة فــى (18.9) و (18.10) وكذلك المساواة (22.6) فإنه يمكن كتابة المعادلتين المصفوفيتين الأخيرتين بشكل مجموعة من المعادلات ، أى أن :

$$\begin{aligned} (sk - k_3)\, b_{1,3} &= k^*_{12} b_{2,4} \\ (sk + k_3)\, b_{2,4} &= k_{12} b_{1,3} \\ (\varepsilon K - k_0)\, b_{1,2} &= sk b_{3,4} \\ (\varepsilon K + k_0)\, b_{3,4} &= sk b_{1,2} \end{aligned} \qquad (22.11)$$

حيث :

$$k_{12} = k_1 + ik_2 \text{ و } k^*_{12} = k_1 - ik_2$$

ويمكن أن تتحقق المعادلة الأخيرة إذا كان :

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} A_1 B_1 \\ A_1 B_2 \\ A_2 B_1 \\ A_2 B_2 \end{pmatrix} \qquad (22.12)$$

وعندئذ نحصل لحساب $A_{1,2}$ ، $B_{1,2}$ على المعادلة التالية

$$\begin{aligned} (sk - k_3)\, B_1 &= k^*_{12} B_2 \\ (sk + k_3)\, B_2 &= k_{12} B_1 \end{aligned} \qquad (22.13)$$

$$\begin{aligned} (\varepsilon K - k_0)\, A_1 &= sk A_2 \\ (\varepsilon K + k_0)\, A_2 &= sk A_1 \end{aligned} \qquad (22.13a)$$

ومن السهل حساب القيمة الخاصة لـ s من (22.13) حيث نجد أن :

$$s = \pm 1 \qquad (22.14)$$

ثم نجد من (22.13a) قيمة ε التالية :

$$\varepsilon = \pm 1 \qquad (22.14a)$$

أى أن الوسيط ε يحدد اشارة الطاقة . وأخيرا نجد بعد أن نأخذ بعين الاعتبار شرط المعايرة :

$$b^+b = b_1^*b_1 + b_2^*b_2 + b_3^*b_3 + b_4^*b_4 =$$
$$= {}^1/_4 (A_1^*A_1 + A_2^*A_2)(B_1^*B_1 + B_2^*B_2) = 1 \qquad (22.15)$$

أن :

$$A_1 = \sqrt{1 + \varepsilon \frac{k_0}{K}}, \quad A_2 = \varepsilon s \sqrt{1 - \varepsilon \frac{k_0}{K}}$$
$$B_1 = s e^{-1/2 i\varphi} \sqrt{1 + s \cos \vartheta}$$
$$B_2 = e^{1/2 i\varphi} \sqrt{1 - s \cos \vartheta} \qquad (22.16)$$

حيث ϑ و φ الزاويتان الكرويتان للمتجه الموجى k

$$k_{12} = k \sin \vartheta e^{i\varphi}, \; k_3 = k \cos \vartheta ،$$

ولكى نحلل النتائج التى حصلنا عليها يمكننا حتى فى الحالة العامة أن نوجه الاندفاع باتجاه المحور z ($\vartheta = 0$ ، $\varphi = 0$ ، $k_x = k_y = 0$ ، $k_z = k$) ، حيث يوافق هذا الاندفاع أربعة حلول تختلف بالاشارة أو بالطاقة ($\varepsilon = \pm 1$) أو بالمغزل ($s = \pm 1$) ، وهذه الحلول تعطى قيم المصفوفة b التالية :

$$b(k, s = 1, \varepsilon = \pm 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 \pm \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \pm \sqrt{1 \mp \frac{k_0}{K}} \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$b(k, s = -1, \varepsilon = \pm 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1 \pm \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \mp \sqrt{1 \mp \frac{k_0}{K}} \end{pmatrix} \qquad (22.17)$$

ويصف الحل $s = 1$ الحالة ، حيث يتجه المغزل باتجاه الاندفاع ، أما $s = -1$ فيصف الحالة المعاكسة عندما يتجه المغزل بعكس الاندفاع ، أما اشارة المقدار ε فتحدد اشارة الطاقة . وليس من الصعب البرهان أن المصفوفتين السابقتين تحققان شرط المعايرة والتعامد أى أن :

$$b^+(k, s', \varepsilon') \, b(k, s, \varepsilon) = \delta_{ss'} \delta_{\varepsilon\varepsilon'}$$

ب) دراسة الخواص المغزلية للالكترون الحر . لندرس أولا الخواص المغزلية للجسيمات مقتصرين على الحالات ذات الطاقة الموجبة ($\varepsilon = 1$) و... يكتب التابع الموجى للحالة التي يتجه فيها المغزل باتجاه المحور z بالشكل التالى :

$$\psi(k,\ \varepsilon = 1) =$$
$$= \frac{1}{L^{3/2}\sqrt{2}}\left[C_1\begin{pmatrix}\sqrt{1+\frac{k_0}{K}}\\ 0\\ \sqrt{1-\frac{k_0}{K}}\\ 0\end{pmatrix} + C_{-1}\begin{pmatrix}0\\ \sqrt{1+\frac{k_0}{K}}\\ 0\\ -\sqrt{1-\frac{k_0}{K}}\end{pmatrix}\right]e^{-icKt+ikz} \qquad (22.18)$$

ويبدو أنه من الممكن تعريف المغزل بحيث لا يكون مسقطه على الاندفاع تكاملا للحركة فقط وإنما مسقطا من مساقطه سيكون تكاملا للحركة ، ويساوى هذا المغزل المصون (تكامل الحركة) بوحدات $\frac{1}{2}h$ فى حالة الحركة الحرة للالكترون ، أى أن :

$$\sigma^0 = \frac{\boldsymbol{k}\,(\sigma k)}{k^2} + \rho_3\,\frac{\sigma k^2 - \boldsymbol{k}\,(\sigma k)}{k^2} \qquad (22.19)$$

ان مصونية المغزل المعرفة بالعلاقة (22.19) ناتجة عن أن كلا من مركباته تتبادل مع الهاملتونيان (22.2) ، وإذا فرضنا أن الاندفاع يتجه باتجاه المحور z فإن مركبة المؤثر σ^0 على الاندفاع أى σ_z^0 والمركبتين المتعامدتين معها أى σ_x^0 و σ_y^0 تعطى بالعلاقات التالية :

$$\sigma_z^0 = \frac{(\sigma \boldsymbol{k})}{k} = \sigma_3,\ \sigma_x^0 = \rho_3\sigma_1,\ \sigma_y^0 - \rho_3\sigma_2$$

وإذا رمزنا للقيم الخاصة لهذا المؤثر بالرمز s^0 فإننا نجد :

- القيمةالخاصة للمسقط على z :

$$s_3^0 = \int \psi^+\sigma_3\psi d^3x = C_1^*C_1 - C_{-1}^*C_{-}$$

- القيمتين الخاصتين للمركبتين الباقيتين :

$$s_1^0 = \int \psi^+ \rho_3 \sigma_1 \psi d^3x = C_{-1}^* C_1 + C_1^* C_{-1}$$
$$s_2^0 = i\,(C_{-1}^* C_1 - C_1^* C_{-1})$$

وإذا أخترنا التابع الموجى كمجموع حالات تختلف فى طاقتها (بما فيها الطاقة السالبة) فإن الحدود الزمنية تنعدم عند حساب القيم الوسطى ، لأن مؤثر المغزل المعمم يتبادل مع الهاملتونيان . لكن عدم تبادل المؤثرات المختلفة ، التى تعتبر فى نفس الوقت تكاملات للحركة (تتبادل مع الهاملتونيان) ، يعنى أن الجملة المدروسة منطبقة (تقابل الاتجاهات المختلفة للمغزل قيمة معينة للاندفاع والعزم الحركى) ، ولهذا تكون القيمة الوسطى للمتجه s^0 تابعة إلى مجموعة مؤلفة من السعات C و C_{-1} . هذا ويمكن البرهان أن قيمة المتجه s^0 فى الفراغ ثلاثى الأبعاد تساوى الواحد لأن :

$$(s_1^0)^2 + (s_2^0)^2 + (s_3^0)^2 = (C_1^* C_1 + C_{-1}^* C_{-1})^2 = 1$$

كما تتحول مركباته عند تطبيق تحويلات لورنتز عليها حسب القانون :

$$\begin{aligned} s_3'^0 &= s_3^0 \cos\gamma + s_1^0 \sin\gamma \\ s_1'^0 &= s_1^0 \cos\gamma - s_3^0 \sin\gamma \\ s_2'^0 &= s_2^0, \end{aligned} \qquad (22.20)$$

حيث :

$$\cos\gamma = \frac{\beta_1 - \beta\cos\vartheta}{B}, \quad \sin\gamma = \frac{\beta\sqrt{1-\beta_1^2}\,\sin\vartheta}{B}$$
$$B = \sqrt{(\beta_1 - \beta\cos\vartheta)^2 + \beta^2(1-\beta_1^2)\sin^2\vartheta} \qquad (22.21)$$

مع العلم أن $c\beta_1 = c\frac{k}{K}$ هى سرعة الجسيم فى الاحداثيات الأصلية ، وتتجه هذه السرعة باتجاه المحور z ، أما $c\beta$ (سرعة جملة الاحداثيات المتحركة ، التى تصنع الزاوية ϑ مع المحور) فيجب أن تقع فى المستوى zx ، ويجب أن نفهم المركبة s_3^0 بأنها المركبة الطولية للمغزل

بالنسبة للاتجاه الجديد للاندفاع ، ومنه نستنتج أن متجه الوحدة فى الفراغ ثلاثى الأبعاد يبقى متجه وحدة ثلاثيا عند تطبيق تحويلات لورنتز عليه .

لنعرف اللولبية : أى دوران متجه الاستقطاب بالنسبة للاندفاع ، عندما $(C_1 = 1, C_{-1} = 0)$ $s_3^0 = 1$. وفى هذه الحالة نجد كما يتضح (22.18) أن :

$$\sigma_x^0 \psi = -i\sigma_y^0 \psi \qquad (22.21a)$$

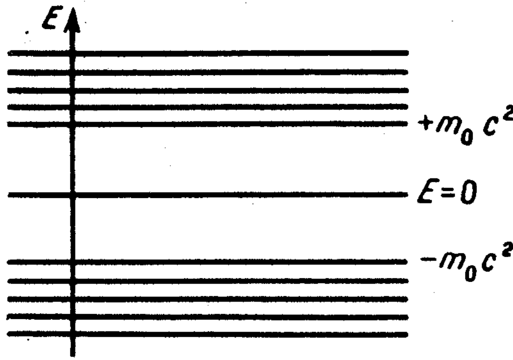
وإذا اعتبرنا أيضا وجود الزمن فى التابع الموجى $\psi \sim e^{-icKt}$ نجد أن الدوران سيكون فى المستوى xy (من المحور x إلى المحور y) المتعامد مع الاندفاع (المحور z) وبالتالى فإن الحالة $s_3^0 = 1$ تقابل اللولبيـة اليمينية فى جملة احداثيات يمينية وهى تقابل لولبية يسارية فى جملة احداثيات يسارية . وتبدو هذه النتيجة طبيعية لأن المتجه k^0 فى الجداء العددى $s_3^0 = (s^0 k^0)$ هو متجه الوحدة القطبى للاندفاع بينما المتجه s^0 هو متجه الوحدة المحورى للمغزل وعند الانتقال من جملة احداثيات يمينية إلى أخرى يسارية ينعكس الاتجاه k^0 بينما يبقى s^0 دون تغيير ، أى تتغير فى هذه الحالة ، الصيغة الرياضية فقط لدراسة اللولبية .

جـ) الحالات ذات الطاقة السالبة . نظرية ديراك فى « الثقوب » ، اكتشاف البوزيترون . تقبل نظرية ديراك حلولا تقابل الطاقات السالبة ($\varepsilon = -1$) بالاضافة إلى الحلول ذات الطاقة الموجبة ($\varepsilon = 1$) (انظر الحل (22.18)) ، أى أن :

$$E = -c\hbar K \qquad (22.21b)$$

ونلاحظ أن وجود الحل ذى الطاقة السالبة ليس خاصا بنظرية ديراك فقط وإنما يجب أن يظهر فى أى نظرية نسبية بما فيها الكلاسيكية ، وفى الحقيقة ترتبط طاقة الجسيم الحر ، كما هو معلوم ، مع الاندفاع وكتلة السكون بعلاقة تقبل الحلين المتكافئين ، أى أن :

$$E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4}$$



الشكل ٢٢ ـ ١ . مخطط سويات الطاقة الممكنة لجسيم ديراك الحر .

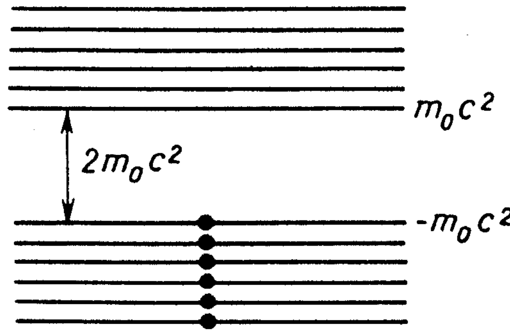
أضف إلى ذلك أن منطقتى الطاقة (الموجبة والسالبة) مفصولتان بمجال عرضه $2m_0c^2$ (الشكل ٢٢ ـ ١) وتبدو الحالات المقابلة للطاقة السابقة ، للوهلة الأولى ، غير حقيقية لأن منطقة الطاقة السالبة تمتد حتى اللانهاية ($E = -\infty$) ولهذا لا يمكن أن تتواجد حالة طاقوية أصغرية ، وهذا يعنى أنه لا يمكن لأى من الحالات العادية أن تكون مستقرة لأن امكانية الانتقال إلى سوية أكثر انخفاضا واردة دائما ، عدا عن ذلك فإن الجسيم ذا الكتلة السالبة (الطاقة السالبة) يجب أن يتصف بمجموعة صفات غريبة ، فهو مثلا يجب أن يتدافع مع الجسيم ذى الكتلة الموجبة أثناء اقترابه منه ، وبصورة خاصة يجب أن تبنى فرضية التفاعل بين الكترونين لهما اشارتان مختلفتان ، بحيث أن الالكترون ذا الكتلة الموجبة يجب أن « يهرب » بينما الالكترون ذو الكتلة السالبة يجب أن « يلحق به » وذلك لكى يبقى مركز كتلتهما ثابتا (لأن الكتلة السالبة) . وبصورة عامة ليس هناك أى مثيل فى الفيزياء الكلاسيكية ، لدراسة الحالات ذات الطاقة السالبة ، ولا يمكن أن تتغير طاقة الجسيم أثناء حركته إلا بشكل مستمر والانتقالات من الحالات ذات الطاقة الموجبة إلى الحالات ذات الطاقة السالبة ، عندما تتغير الطاقة

قفزا بمقدار $\Delta E \geqslant 2m_0c^2$ غير ممكنة اطلاقا . وبما أن وجود الحالات ذات الطاقة السالبة غير وارد منذ البداية فإننا لن نحتاج لدراسة مثل هذه الحالات فيما بعد ، إلا أن الوضع يتغير تماما فى النظرية الكوانتية حيث لا تحدث الانتقالات بين حالات الطيف المستمر وحدها وإنما بين حالات الطيف المتقطع أيضا ، ولا يمكننا الآن استثناء الحالات ذات الطاقة السالبة آليا لأن احتمال الانتقال بين السويات التى طاقتها $+m_0c^2$ وتلك التى طاقتها $-m_0c^2$ لا يساوى الصفر ، ولتجنب انتقال الالكترونات إلى الحالات ذات الطاقة السالبة ، افترض ديراك عام ١٩٣١ أن جميع السويات ذات الطاقة السالبة مملوءة بالالكترونات ، ونتيجة لذلك لا يمكن للالكترونات ذات الطاقة الموجبة أن تنتقل فى الظروف العادية إلى هذه السويات (الشكل ٢٢ ـ ٢) . ولنفترض الآن أن طاقة الكوانت ـ جاما أكبر من $2m_0c^2$ ، وعندما يؤثر هذا الكوانت على الكترون الفراغ ، أى على الكترون طاقته سالبة فإنه ينقله إلى حالة ذات طاقة موجبة ، وعندئذ يظهر الكترون ذو طاقة موجبة بدلا من أن تمتص النواة الكوانت جاما (الشكل ٢٢ ـ ٣) ، ويظهر « ثقب » أو « فجوة » فى الخلفية المملوءة بالالكترونات التى سويات طاقتها سالبة . ويتلخص النجاح الحاسم لفرضية ديراك فى تفسيره لهذا « الثقب » بأنه (أى الثقب) عبارة عن جسيم كتلته تساوى كتلة الالكترون (بوزيترون) . وفى الحقيقة إذ فرضنا أنه فى لحظة البدء لم يوجد أى جسيم وعندئذ فإن طاقة الخلفية « الصفرية » E_{vac} تساوى مجموع طاقة الالكترونات التى سويات طاقتها سالبة

$$E_{\text{vac}} = \sum_{n'_-} E_{n'_-} \qquad (22.22)$$

أما الشحنة الصفرية فتساوى

$$e_{\text{vac}} = -\sum_{n'_-} e_0 \qquad (22.23)$$



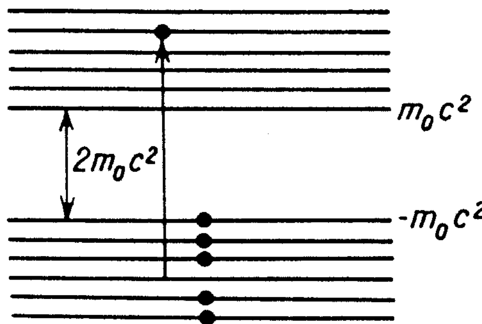
الشكل ٢٢ ـ ٢ . مخطط طاقة الصفر لفراغ الكترون - بوزيترون .

وهكذا نرى أنه عندما لا تتواجد جسيمات حقيقية فهذا يعنى ، من وجهة نظر « الثقوب » أن كل الحالات ذات الطاقة الموجبة فارغة ، وكل الحالات ذات الطاقة السالبة مشغولة وتسمى هذه الحالة بالحالة الصفرية (الشكل ٢٢ ـ ٢) وعندما ينتقل الكترون من حالة n_- طاقتها سالبة إلى حالة أخرى n_+ طاقتها موجبة فإن تغير الطاقة للجملة سيكون يكتب بالشكل التالى :

$$\Delta E = E_{n_+} + \sum_{n'_-}{}' E_{n'_-} - \sum_{n'_-} E_{n'_-} \qquad (22.24)$$

أو أن المقدار

$$\Delta E = E_{n_+} - E_{n_-} = E_{n_+} + |E_{n_-}| \qquad (22.25)$$



الشكل ٢٢ ـ ٣ . مخطط تشكل زوج من الكترون - بوزيترون .

سيقابل مجموع* الطاقتين الموجبتين للجسيمين الناتجين . وقد برهنت مناقشات مشابهة ، أجريت على الشحنة أن لأحد الجسيمين الناتجين وهو الموافق للثقب شحنة مخالفة لشحنة الالكترون ، أى أن :

$$e = -e_{n_+} - \sum_{n_-}' e_0 + \sum_{n_-} e_0 = -e_{n_+} + e_{n_-} = -e_0 + e_0, \quad (22.26)$$

وهكذا نرى أن انتقال الالكترون من حالة ذات طاقة سالبة إلى أخرى ذات طاقة موجبة (ومن الواضح أن هذا يحدث نتيجة لامتصاص الكوانت جاما ذى طاقة أكبر من $2m_0c^2$) يؤدى إلى خلق جسيمين ، وهنا يمكن اعتبار الحالة غير المشغولة للالكترون ذى الطاقة السالبة ، الثقب ، كأنها مشغولة بجسيم ذى شحنته** موجبة $+e_0$ ، وقد سمى هذا الجسيم الذى تنبأ به ديراك ، بالبوزيترون ، واكتشفه اندرسون عام ١٩٣٢ فى الأشعة الكونية ،

وبالإضافة إلى دراسة الإلكترون (الجسيم) ، نرى أن نظرية ديراك الآن تدرس بشكل طبيعى البوزيترون (الجسيم المضاد) الذى يحقق تابعه الموجى معادلة ديراك التى تكون فيها طاقة الجسيم وشحنته موجبتين . ولا تستبعد النظرية الأخيرة حدوث التحول المعاكس أى أنه عند وجود ثقب يمكن للالكترون ذى الطاقة الموجبة أنْ ينتقل إلى سوية حرة من السويات ذات الطاقة السالبة ، وفى هذه الحالة يتحول الالكترون والبوزيترون إلى الكوانت جاما . وطبقا لقوانين مصونية الطاقة والاندفاع لا يجوز أن يكون عدد الكوانتات جاما الناتجة عن ذلك أقل من اثنين .

---

* تعنى الفتحة على الرمز Σ أن المجموع سيكون لكل الحالات n_- ما عدا الحالة $n_- = n_-$

** نلاحظ أنه يمكن بالاستفادة من طرائق النظرية الموجية للحقول ، بناء النظرية المتناظرة بالنسبة لاشارة الشحنة ، للفراغ الالكترونى - البوزيترونى ، إلا أنه أمكن بواسطة هذه النظرية غير المتناظرة بالنسبة للالكترونات البوزيترونات (الكترون - جسيم ، بوزيترون - ثقب) تغير كثير من الظواهر المرتبطة بتحول الجسيمات .

د) مفهوم فراغ الالكترون ـ البوزيترون . لقد تم الحصول على صيغة انزياح السويات اللامبى (21.22) نتيجة لحساب تفاعل الالكترون مع الفراغ الكهرطيسى ، إلا أنه يوجد بالاضافة إلى الفراغ الكهرطيسى فراغ الكترونى ـ بوزيترونى وفراغ الجسيمات الأخرى وهذا ما يسمح لنظرية الحقول ، التى تبدو عامة لدرجة معقولة ، بحساب تأثير الفراغ الالكترونى ـ البوزيترونى لأن دراسة خواص فراغ الجسيمات المختلفة تلعب دورا هاما فى الميكانيكا الكوانتية المعاصرة وبصورة خاصة نرى أنه يمكن دراسة التفاعل الكهرطيسى « قانون كولون » كنتيجة للتفاعل بين شحنتين فى الفراغ الكهرطيسى حيث يصدر الالكترون الأول « فوتونا كاذبا » يمتصه الثانى ، وهكذا يمثل الحقل الكهربائى حالة مضطربة للفراغ الكهرطيسى ، ومن جهة ثانية يمكن اعتبار الفراغ بمثابة خزان « تخرج » منه الجسيمات عند ولادتها ، وتدخل إليه بأضداد الجسيمات عند فنائها ، فى الحقيقة يعتبر الفراغ الالكترونى ـ البوزيترونى مألوفا لنا فهو يمثل الصورة الخلفية للالكترونات الموجودة فى الحالات ذات الطاقات السالبة ، وليس لهذا الفراغ مثيل كلاسيكى ، ولهذا لا يوجد تفسير كلاسيكى فى حالة الفراغ الكهرطيسى ، ويستطيع الحقل الكولونى أن يستقطب هذا الفراغ ، (فكأن الالكترون يوجد فى مادة عازلة) ونتيجة لذلك تظهر طاقة تفاعل اضافية تحسب بالعلاقة التالية :

$$V_{e,p} = -\frac{4}{15} e_0^2 \alpha \left(\frac{\hbar}{m_0 c}\right)^2 \delta(r) \qquad (22.27)$$

وبمقارنة هذه الصيغة مع (21.18) نجد أن لانزياح السويات المرتبط مع تقلبات الحقل المغناطيسى اشارة معاكسة بالمقارنة مع (22.27) ، ويبدو بصورة خاصة أن الفراغ الالكترونى ـ البوزيترونى يؤثر تأثيرا شديدا على الخواص المغناطيسية للالكترون ، ونتيجة لذلك كما يرى شفينجر يصبح العزم المغناطيسى له أكبر من مغناطيون بور ، أى أن :

$$\mu = -\mu_0\left(1 + \frac{\alpha}{2\pi}\right) \qquad (22.28)$$

ويحسب التصحيح على العزم المغناطيسى للالكترون باضافة الحدود التالية :

$$\Delta\mu_{e,p} = -\left(\frac{\alpha}{2\pi} - 0{,}328\frac{\alpha^2}{\pi^2} + 0{,}13\frac{\alpha^3}{\pi^3}\right)\mu_0 = -0{,}0011596\mu_0 \qquad (22.29)$$

التى تتوافق بشكل جيد مع المعطيات التجريبية التى تم الحصول عليها بطرائق الاشعاع الطيفى .

هـ) المعادلة الموجية للبوزيترون . لتوضيح المعنى الفيزيائى للحلول التى تعطى قيما سالبة للطاقة ، عندما يوجد حقل مغناطيسى ، نكتب معادلة ديراك الأساسية التالية :

$$\left\{-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi + c\left[\alpha_1\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c}A_x\right) + \alpha_2\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c}A_y\right) + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \alpha_3\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c}A_z\right)\right] - \rho_3 m_0 c^2\right\}\psi = 0 \qquad (22.30)$$

ثم نكتب المعادلة المرافقة لها عقديا ، أى أن :

$$\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi + c\left[\alpha_1\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c}A_x\right) - \alpha_2\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c}A_y\right) + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \alpha_3\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{e}{c}A_z\right)\right] - \rho_3 m_0 c^2\right\}\psi^* = 0 \qquad (22{,}31)$$

ويمكن الحصول عليها إذا لاحظنا أن $\alpha_1^* = \alpha_1$ ، $\alpha_2^* = -\alpha_2$ ، $\alpha_3^* = \alpha_3$ ، $\rho_3^* = \rho_3$
وأن التابع الموجى المرافق عقديا للتابع ψ^* هو التالى :

$$\psi^* = \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \\ \psi_3^* \\ \psi_4^* \end{pmatrix} \qquad (22.32)$$

والذى يختلف كما يبدو وبوضوح عن المرافق الهرميتى التالى :

$$\psi^+ = (\psi_1^*\psi_2^*\psi_3^*\psi_4^*). \qquad (22.33)$$

ونلاحظ أن المعادلة المرافقة عقديا تتكافأ تماما مع المعادلة المرافقة هرميتيا

$$\psi^+\left\{\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}-e\Phi\right)-c\left[\alpha_1\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}-\frac{e}{c}A_x\right)+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\alpha_2\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}-\frac{e}{c}A_y\right)+\alpha_3\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}-\frac{e}{c}A_z\right)\right]-\rho_3 m_0c^2\right\}=0$$

(22.34)

وليس من الصعب التحقق من ذلك إذا كتبنا كلا من المعادلتين (22.31) و (22.34) واعتبرنا قاعدة تأثير المؤثر الواقعة بعد التابع الموجى :

$$\psi^+\frac{\partial}{\partial t}\rightarrow-\frac{\partial\psi^+}{\partial t},\quad \psi^+\frac{\partial}{\partial x}\rightarrow-\frac{\partial\psi^+}{\partial x} \qquad (22.35)$$

ولنجرى فى معادلة ديراك التحويل التالى :

$$\psi^*=i\alpha_2\rho_3\tilde{\psi} \qquad (22.36)$$

وعندئذ نجد ، باعتبار صحة العلاقات التبادلية لمصفوفة ديراك ، المعادلة التى يحققها التابع الموجى ، أى أن :

$$\left\{-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}+e\Phi-c\left[\alpha_1\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{e}{c}A_x\right)+\alpha_2\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}+\frac{e}{c}A_y\right)+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\alpha_3\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}+\frac{e}{c}A_z\right)\right]-\rho_3m_0c^2\right\}\tilde{\psi}=0 \qquad (22.37)$$

وهى المعادلة التى تصف حركة البوزيترون لأنها تختلف عن الأساسية (22.30) بتغيير e إلى $-e$ ، فإذا علمنا أيضا أن الحالة $\psi(r,t)=e^{-i\frac{|E|}{\hbar}t}\psi(r)$ تفسر كحالة ذات طاقة موجبة ، وأن الحالة $\psi^*(r,t)=e^{-i\frac{|E|}{\hbar}t}\psi^*(r)$ تفسر كحالة ذات طاقة سالبة ، فيجب أن تفهم اشارة الطاقة فى التابع $\tilde{\psi}$ بشكل مختلف عن التابع ψ^* ، وبعبارة أخرى يجب أن تنسب الحالات ذات الطاقة الموجبة من المعادلة (22.37) ، إلى البوزيترون بينما تنسب الحالات ذات الطاقة السالبة إلى الالكترونات .

و) مدلول نظرية ليوديرس - باولى . نلاحظ أن معادلة ديراك يجب أن لا تتغير بالنسبة للانعكاس الصغير للزمن (التحويل - CT) الذى يؤول

إلى تحويلين الأول هو التحويل المرافق شحنيا ($e \to -e$ التحويل - C) والثانى هو تحويل الانعكاس الكبير للزمن ($t \to -t$, $\Phi \to -\Phi$ التحويل -T) وفى الحقيقة أن تطبيق التحويل - CT على المعادلة (22.30) يعطيها الشكل التالى :

$$\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi - c\left[\alpha_1\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c}A_x\right) + \alpha_2\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c}A_y\right) + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \alpha_3\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{e}{c}A_z\right)\right] - \rho_3 m_0 c^2\right\}\psi = 0$$

(22.38)

وتؤول المعادلة الأخيرة عند اجراء التغيير $\psi \to \sigma_2\psi^*$ ، إلى المعادلة المرافقة عقديا (22.31) ، (كذلك نرى أن المعادلة المرافقة عقديا تؤول إلى الأساسية) ويمكن البرهان أن معادلة ديراك لا تتغير بالنسبة لانعكاس الفراغ التالى : ($r \to -r$ ، و $A \to -A$ ، التحويل - P) وفى الحقيقة نرى أن تطبيق التحويل - P على معادلة ديراك يحولها إلى الشكل التالى :

$$\left\{-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi + c\left[\alpha_1\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c}A_x\right) + \alpha_2\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c}A_y\right) + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \alpha_3\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c}A_z\right)\right] - \rho_3 m_0 c^2\right\}\psi = 0 \qquad (22.39)$$

وباجراء التغيير $\psi \to \rho_3\psi$ نجد أنها تتحول إلى الشكل الأولى (22.30) وهكذا نرى أن معادلة ديراك يجب أن لا تتغير بالنسبة للتحويل CTP الثلاثى المشترك (نظرية ليوديرس - باولى) .

ز) **المعادلة الموجية للنيترينو** . لوصف حركة جسيم مغزله يساوى 1/2 أو 1 وكتلة سكونه تساوى الصفر (النيترينو) من الممكن استخدام المعادلة التى تحوى مصفوفات باولى الثنائية الأسطر (معادلة وايل) أو معادلة ديراك التى تنقسم إلى معادلتين مستقلتين ، وفى الحقيقة كما يتضح من (18.1) يمكن فى هذه الحالة استخراج الجذر التربيعى بواسطة

مصفوفات باولى الثنائية الأسطر ولهذا نكتب عوضا عن معادلة ديراك ، معادلة تحوى تابعا ذا مركبتين $\varphi = \binom{\varphi_1}{\varphi_2}$ (معادلة ويل) ، أى أن :

$$(E - c(\sigma' p))\varphi = 0 \qquad (22.40)$$

وهذه المعادلة خلافا لمعادلة ديراك ليست لا متغيرة بالنسبة بالنسبة لانعكاس الفراغ لأنه بعد اجراء فيها التغيير من النوع $p \to -p$ لا يمكن بأى تحويل كان ، أن نرجعها إلى وضعها الأساسى ، ومن جهة أخرى تنقسم معادلة ديراك (بالنسبة للجسيم ذى الكتلة $m_0 = 0$) ذات الأربع مركبات إلى معادلتين موجيتين مستقلتين ، نختار الحل الأول بالشكل التالى :

$$s_3^0 = -\varepsilon = -\frac{E}{|E|} \qquad (22.41)$$

أى سنعتبر أن للجسيم ذى الطاقة الموجبة $\varepsilon = 1$ لولبية يسارية وأن للجسيم ذى الطاقة السالبة $\varepsilon = -1$ (النترينو المضاد) لولبية يمينية وعندئذ يكون الحل الثانى بالشكل التالى :

$$s_3^0 = \varepsilon = \frac{E}{|E|} \qquad (22.42)$$

أى على العكس ، يجب أن يكون للجسيم ذى الطاقة الموجبة (النترينو) لولبية يمينية ، ويكون للجسيم ذى الطاقة السالبة (النترينو المضاد) لولبية يسارية . ولا تتغير العلاقتان (22.41) و (22.42) عند تطبيق تحويلات لورنتز عليهما ، وهذا واضح من المعادلتين (22.20) و (22.21) حيث $\beta_1 = 1$. ونتيجة لاكتشاف الظاهرة المعروفة بعدم مصونية الزوجية المرتبطة اقترح كل من لى ويانغ وكذلك لانداو أن كتلة النترينو تساوى الصفر وأنه يوصف بمعادلة « ويل » ذات المركبتين وقد قالوا أن معادلة ويل لا تغير بالنسبة للتحويل ـ P يعوض بعدم تغيرها بالنسبة للتحويل ـ C (يجب أن لا تتغير لولبية النترينو عند الانتقال من النترينو إلى النترينو المضاد).وهكذا نرى أن معادلة ويل لا تتغير عند تطبيق التحويل المشترك ـ

CP وكذلك لا تتغير عند تطبيق التحويل - T ، وهذا ضرورى لكى تتحقق نظرية ليوديرس - باولى $(CPT = \text{const})$. ومن جهة ثانية يمكن أيضا أن تستخدم معادلة ديراك لوصف النترينو على أن نجعل فيها كتلة السكون تساوى الصفر ، ثم نعزل النترينو ذا اللولبية المعينة ، إلا أنه يوجد بجانب الحل الأول فى النظرية رباعية المركبات (النترينو - دوران يسارى ، النترينو المضاد - دوران يمينى) ، وسيكون من الغرابة إذا لم يكن للحل الثانى أى تطبيق فيزيائى . وقد اكتشف حديثا ما يسمى بالنترينو الميونى بجانب النترينو الالكترونى (أى عندما ينطلق النترينو مع البوزيترون والنترينو المضاد مع الالكترون) ، هذا النترينو كما يبدو يوصف بالحل الثانى لمعادلة ديراك وفى هذه الحالة يجب أن ينطلق نترينو ذو دوران يمينى مع الميون السالب ، كما ينطلق نترينو مضاد ذو دوران يمينى مع الالكترون وطبقا لهذه النظرية يجب أن تكون للالكترونات (e^-) وللميونات السالبة (μ^-) شحنات نيترينية مختلفة (يجب أن يكون للالكترون شحنة نيترينية وللميون السالب μ^- شحنة لا نيترينية) ولهذا يكون التفكك $\mu^- \to e^- + \gamma$ محظورا .

د) **التكميم الثانى لمعادلة ديراك** . سنقتصر على الحركة الحرة، إذ يمكن كتابة حل معادلة ديراك فى هذه الحالة بالشكل ، انظر (22.5) ، التالى :

$$\psi(r, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{k, \varepsilon, s} b(k, s, \varepsilon) C(k, s, \varepsilon) e^{-ic\varepsilon Kt + ikr} \qquad (22.43)$$

حيث $b(k, s, \varepsilon)$ مصفوفات تحقق شرط المعايرة التالى :

$$b^+(k, s', \varepsilon') b(k, s, \varepsilon) = \delta_{ss'}\delta_{\varepsilon\varepsilon'} \qquad (22.44)$$

أما $C(k, s, e)$ فهى سعات (ليست مصفوفات) تعين مربعات قيمتها المطلقة (طويلتها) باحتمال وجود الجسيم فى الحالة (k, s, ε) ، وإذا اعتبرت

معادلة ديراك كنتيجة للتكميم الأول فإن $\psi(r, t)$ يصف حالة جسيم واحد ، هذا بالاضافة إلى أن $C(k, s, \varepsilon)$ تكون أعدادا عادية أى أنها تتبادل مع بعضها . وإذا حسبنا القيمة الوسطى من الحالة (22.43) نجد :

- القيمة الوسطى للهاملتونيان H :

$$H = \int \psi^{+} \mathrm{H} \psi \, d^3x = \sum_{k \; s, \varepsilon} ch\varepsilon K C^{+} C \qquad (22.45)$$

- ومتوسط الاندفاع ثلاثى الأبعاد :

$$\boldsymbol{G} = \int \psi^{+} \mathbf{p} \psi \, d^3x = \sum_{k, s, \varepsilon} \hbar k C^{+} C \qquad (22.46)$$

- ومتوسط شحنة الجسيم

$$Q = e \int \psi^{+} \psi \, d^3x = e \sum_{k, s, \varepsilon} C^{+} C \qquad (22.47)$$

- وأخيرا نحسب متوسط مسقط المغزل على اتجاه الاندفاع ، انظر (22.4) .

$$S = \int \psi^{+} \frac{(\nabla \sigma)}{ik} \psi d^3x = \sum_{k, s, \varepsilon} s C^{+} C \qquad (22.48)$$

حيث

$$C = C(k, s, \varepsilon) \qquad (22.49)$$

وقد حصلنا على العبارات (22.45) - (22.48) باستخدام (22.43) واعتبار العلاقة التالية :

$$\frac{1}{L^3} \int e^{i (k - k') r} \, d^3x = \delta_{n_1 n_1'} \delta_{n_2 n_2'} \delta_{n_3 n_3'} = \delta_{kk'} \qquad (22.50)$$

وكذلك شروط المعايرة والتعامد (22.44) . ولكى نعمم معادلة ديراك الثانية أى لوصف جملة عدد جسيماتها متغير نستفيد ، كما هو الحال عند تكميم الحقل الكهرطيسى ، من أقواس بواصون الكوانتية ، انظر (6.45) ، التى تكتب بالشكل التالى :

$$-icK\varepsilon C = \frac{i}{\hbar}(HC - CH) \tag{22.51}$$

أى أن :

$$-icK\varepsilon C = -\frac{i}{\hbar}\sum_{k',s',\varepsilon'} c\hbar\varepsilon' K[(C'^{+}C + CC'^{+})C' - - C'^{+}(CC' + C'C)] \tag{22.52}$$

حيث

$$C' = C(k', s', \varepsilon')$$

ولكى تتحقق العلاقتان (22.51) و (22.52) يجب كتابة العلاقات التبادلية التالية :

$$C'^{+}C + CC'^{+} = \delta_{kk'}\delta_{ss'}\delta_{\varepsilon\varepsilon'},$$
$$C'C + CC' = 0, \quad C'^{+}C^{+} + C^{+}C'^{+} = 0 \tag{22.53}$$

أى أن ما يختلف عن الصفر هو اللاتبادلى التالى :

$$C^{+}C + CC^{+} = 1 \tag{22.54}$$

وهذه العلاقات التبادلية تقابل احصاءات فيرمى ـ ديراك (انظر البند ٢٤) وفى هذه الحالة يمكن أن نطلب أن تكون طاقة جميع الجسيمات موجبة فى الحالتين $\varepsilon = 1$ و $\varepsilon = -1$ ، وبصورة عامة إذا كان للهاملتونيان الشكل التالى :

$$H = \sum c\hbar K[C^{+}(\varepsilon = 1)C(\varepsilon = 1) \pm C^{+}(\varepsilon = -1)C(\varepsilon = -1)]$$

فيجب أن تدخل علاقات بوزى التبادلية عند وجود الاشارة الموجبة (أنظر مثلا حقل الفوتونات البند ٩) أما عند وجود الاشارة السالبة فيجب ادخال علاقات فيرمى التبادلية ، ويمكننا تحقيق العلاقات التبادلية (22.54) إذا كتبنا :

$$C^{+}C = N, \quad CC^{+} = 1 - N \tag{22.55}$$

حيث N عدد الجسيمات فى الحالة (k, s, ε) . وبما أن هذه الجداءات تدخل

بشكل متناظر فإن الحل الثانى المحقق للمعادلة (22.54) سيكون :

$$C^+C = 1 - N, \quad CC^+ = N \qquad (22.56)$$

ولكى تبقى طاقة الجسيمات موجبة يجب أن نختار من أجل للجسيمات التى يكون لها 1 = ε العلاقات (22.55) وللجسيمات التى يكون لها 1- = ε العلاقات (22.56) ، اضافة لذلك يجب أن نجعل طبقا للصيغ (22.43) - (22.48) ما يلى :

$$C(k, s, \varepsilon = 1) = C(k, s), \quad C^+(k, s)\, C(k, s) = N_s(k) \qquad (22.57)$$
$$C(k, s, \varepsilon = -1) = \tilde{C}^+(-k, s), \quad \tilde{C}^+(-k, s)\, \tilde{C}(-k, s) = \tilde{N}_s(-k)$$

وعندئذ نجد* أن القيم الوسطى السابقة (22.45) - (22.48) تعطى بالعلاقات التالية :

- متوسط الهاملتونيان

$$H = \sum_{k, s} c\hbar K (N_s + \tilde{N}_s - 2) \qquad (22.58)$$

- متوسط الاندفاع

$$G = \sum_{k, s} \hbar k (N_s + \tilde{N}_s) \qquad (22.59)$$

- متوسط الشحنة

$$Q = e \sum_{k, s} (N_s - \tilde{N}_s + 2) \qquad (22.60)$$

- متوسط مسقط المغزل على اتجاه الاندفاع

$$S = \sum_{k, s} s (N_s + \tilde{N}_s) \qquad (22.61)$$

---

* لن نستطيع التخلص من الحالات ذات الطاقة السالبة إذا خضعت جسيمات ديراك لاحصاءات بوزى - أينشتين ، لأن الهاملتونيان عندئذ يساوى

$$H^B = \sum_{k, s} c\hbar K (N_s - \tilde{N}_s) \qquad (22.58a)$$

حيث

$$N_s(k) = N_s(k, \varepsilon = 1), \quad \tilde{N}_s(k) = N_s(-k, \varepsilon = -1)$$

ومنه نستنتج ما يلى : ان الحل الموافق لاحصاءات فيرمى - ديراك هو الحل الوحيد الذى يؤدى إلى أن يكون لكل من نوعى الجسيمات N_s و $\tilde{N}_s$ طاقة موجبة ، أما اشارة هذين النوعين فيجب أن تكون متعاكسة ، أى أنه إذاوافقت الجسيمات N_s الالكترونات ، فستوافق الجسيمات $\tilde{N}_s$ البوزيترونات (الجسيمات المضادة) أما متجه المغزل $s = \pm 1$ فيصف توجيه مغزل الالكترونات والبوزيترونات أما المتجه S وكذلك متجه الاندفاع k فيغيران من اشارتهما عند الانتقال من الجسيمات ذا الطاقة الموجبة إلى الجسيمات ذات الطاقة السالبة ، ولكن القيمة s التى تساوى الجداء العددى لمتجهى الوحدة $s = (k^0 s^0)$ لا يمكن أن تتغير ، اضافة إلى ذلك ستظهر طاقة صفرية سالبة لانهائية أى أن :

$$H_0 = -\sum_k 2c\hbar K \qquad (22.62)$$

وشحنة صفرية لانهائية ، أى أن :

$$Q_0 = \sum_k 2e \qquad (22.63)$$

وتختفى القيمة الصفرية لكل من المغزل والاندفاع فى هذه الحالة ، ولكى تتحقق علاقات بوزى - اينشتاين التبادلية (للفوتونات مثلا) أخذنا المصفوفات اللامنتهية لكل من السعات الكوانتية المكممة ثانية ، انظر (9.38) ، وللحالات التى تصف عددا متغيرا من الجسيمات ، انظر (9.43) ، وتقابل هذه المصفوفات غير المنتهية وجود أى عدد من الجسيمات فى أى من الحالات الكوانتية . ولكى تتحقق علاقات فيرمى - ديراك التبادلية :

$$C^+C + CC^+ = 1 \qquad (22.64)$$

يجب أن نأخذ عوضا عن المصفوفات اللامنتهية ، لكل من السعات المصفوفات الثنائية الأسطر التالية :

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (22.65)$$

وكذلك لعدد الجسيمات :

$$f(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad f(1) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (22.66)$$

حيث يصف $f(0)$ الحالة التى ينعدم فيها عدد الجسيمات و $f(1)$ الحالة التى يوجد فيها جسيم واحد ، وعندئذ تتحقق العلاقات التبادلية (22.64) . عدا عن ذلك ستصبح السعات عبارة عن مؤثرات الفناء لأن تأثيرها على تابع عدد الجسيمات إذا حسب بقواعد الحساب المصفوفى ، يساوى :

$$Cf(0) = 0, \quad Cf(1) = f(0) \qquad (22.67)$$

أما السعة C^+ فتقابل مؤثر الخلق :

$$C^+f(0) = f(1), \quad C^+f(1) = 0 \qquad (22.68)$$

ومن هنا نرى أنه لا يمكن أن يوجد فى كل حالة كوانتية أكثر من جسيم واحد ، ومن السهل أن نبرهن ذلك باستعمال العلاقات (22.67) و (22.68) أى أن :

$$C^+Cf(N) = Nf(N), \quad CC^+f(N) = (1 - N)f(N) \qquad (22.69)$$

أى أن لمربعات السعات نفس القيم الخاصة (22.55) و (22.56) .

القسـم الثالث

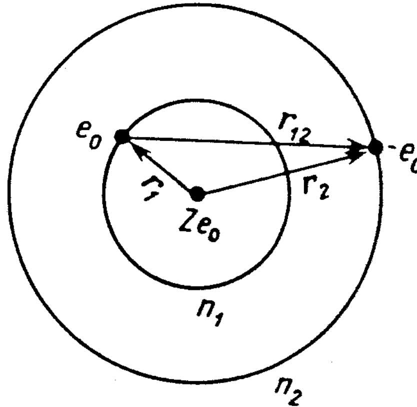
النظـرية الكوانتيـة للجسـيمات

البند ٢٣ ـ نظرية ذرة الهليوم باهمال الحالات المغزلية

أ) **مبادئ عامة** . تعتبر ذرة الهليوم أبسط ذرة متعددة الالكترونات ويتحرك حول نواتها « Z = 2 » الكترونان ، وبالرغم من بساطتها فإن الخواص الكيفية الأساسية للنظرية الكوانتية لمجموعة جسيمات تبدو واضحة فيها ، فعند وجود الكترونين فى النظرية الكلاسيكية يمكن أن نعطى لأحدهما الدليل «1» وللثانى الدليل «2» ثم نتابع حركة كل منهما على حدة من البداية حتى النهاية ، وطبقا للميكانيكا الكوانتية لا يمكن أن نرقم الالكترونين إلا إذا كانا بعيدين عن بعضهما ، لكن عندما يكون الالكترونان قريبين جدا من بعضهما بحيث أن التابع الموجى لكل منهما لا يساوى الصفر ، لا يجوز بسبب تطابق الالكترونات،الجزم فى أى نقطة من الفراغ يقع الالكترون «1» وفى أى نقطة يقع الالكترون «2».ويبدو أن تطابق الالكترونات هو خاصة أساسية من خواص الجسيمات فى منظوماتها الدقيقة ، لأنها تؤدى إلى نوع جديد من القوى التبادلية التى ليس لها شبيه كلاسيكى ، واضافة إلى ذلك تلعب الخواص المغزلية دورًا كبيرًا فى الذرات متعددة الألكترونات ، تلك الخواص التى لم تحسب لا فى النظرية الكلاسيكية ولا فى نظرية بور ، ونلاحظ بهذا الصدد أن القوى المغزلية تدخل كتصحيح فقط فى الذرة التى لا تحوى سوى الكترون واحد ، هذا التصحيح الذى لم يحسب فى التقريب الأول ولهذا استطاعت نظرية بور تفسير سلسلة من الظواهر فى الذرات الشبيهة بالهيدروجين أو الذرات ذات الالكترون الواحد ولم تستطع نظرية

بور بناء نظرية للذرات ذات الكترونين أو أكثر لأنها غير قادرة أن تحسب القوى المغزلية والقوى التبادلية ، ولتوضيح جوهر النظرية الكوانتية لمجموعة جسيمات متطابقة فى خصائصها ، سندرس بالتفصيل الذرات الشبيهة بالهليوم وهو ما ينطبق على ذرة الهليوم المعتدلة وذرة الليتيوم المشردة مرة واحدة Li^{+} وذرة البيريليوم المشردة مرتين Be^{++} إلى آخره .

ب) المعادلات الأساسية . لنشرح أولا الطبيعة الفيزيائية للقوى التبادلية المرتبطة بالتطابق ، أى بعد تمييز الالكترونات ، والتى تأخذ بعين الاعتبار القوى المغزلية فى هذا البند* . ولنفرض أن موضعىالالكترونين الأول والثانى يتحددان بنصفى القطريين الشعاعيين r_1 و r_2 (يعتبر المبدأ فى هذه الحالة مركز الذرة الثابت)، انظر الشكل ٢٣ ـ ١ ، وسنرمز للحالات ذات الأعداد الكوانتية (n_1, l_1, m_1) و (n_2, l_2, m_2) بالرمز n_1 و n_2 على الترتيب



الشكل ٢٣ ـ ١ . ذرة الهليوم .

* ويجوز ذلك لأن المسألة تقبل حلا ضمن التقريب المدروس عن طريق فصل المتحولات الفراغية والمغزلية وسنأخذ المغزل بعين الاعتبار فى البند ٢٤ .

ويقصد بذلك الأعداد الكوانتية قاطبة . ويتم تعيين حركة كل الكترون على حدة دون اعتبار تفاعلهما مع بعضهما بواسطة معادلة شرودينجر التالية :

$$(E_{n_j} - H_j)\,\psi_{n_j}(r_j) = 0 \qquad (23.1)$$

حيث

$$H_j = T_j + V_j, \quad T_j = \frac{1}{2m_0}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_j\right)^2$$

$$V_j = -\frac{Ze_0^2}{r_j} \qquad (23.2)$$

أما الدليل j فيأخذ القيمة «1» عندما ندرس الالكترون الأول و «2» عندما ندرس الالكترون الثانى ، ونحصل عندئذ على الطاقة E_{n_j} التى تساوى :

$$E_{n_j} = -\frac{R\hbar Z^2}{n_j^2} \qquad (23.3)$$

أما التوابع الخاصة ψ_{n_j} فيجب أن تتطابق مع التوابع الموجية للذرات الشبيهة بالهيدروجين ، تلك التوابع التى تحقق شرط التعامد والمعايرة :

$$\int \psi^*_{n_j}(r)\,\psi_{n_{j'}}(r)\,d^3x = \delta_{n_j n_{j'}} \qquad (23.4)$$

وإذا اعتبرنا بعد ذلك تفاعل الالكترونين ، أى أن :

$$V' = \frac{e_0^2}{|r_1 - r_2|} = \frac{e_0^2}{r_{12}} \qquad (23.5)$$

فيمكن دراسة حركة الجملة المؤلفة من الكترونين بشكل مستقل ، ولهذا لابد لنا من وصف كل الجملة التى يساوى الهاملتونيان من أجلها :

$$H = H_1 + H_2 + V' \equiv H^0 + V' \qquad (23.6)$$

ومعادلة شرودينجر من أجلها :

$$(E - H^0 - V')\,\psi(r_1, r_2) = 0 \qquad (23.7)$$

حيث E هى الطاقة الكلية و $\psi(r_1, r_2)$ التابع الموجى العام المتعلق بكل من احداثيات الالكترونين الأول والثانى ، وهنا أيضا ، كما فى مسألة الالكترون الواحد يمثل المقدار $\psi^*(r_1, r_2)\,\psi(r_1, r_2)$ كثافة احتمال ظهور الالكترون

الأول فى النقطة r_1 والثانى فى النقطة r_2 ولهذا يكون شرط المعايرة للتابع $\psi(r_1, r_2)$ كما يلى :

$$\int \psi^*(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\,\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\,d^6x = 1 \qquad (23.8)$$

وبما أنه من الصعب جدا حل المعادلة (23.7) فإننا سنستفيد من نظرية شرودينجر لدراسة الاضطراب التى شرحناها فى البند* وذلك بفرض أن تفاعل الالكترونين مع بعضهما (الطاقة V') لا يغير إلا قليلا من الحركة المستقلة لكل منهما فى الحقل الكولونى للنواة ، (وسنقيّم فيما بعد دقة هذا التقريب) ، ولندرس أولا التقريب الأول حيث يمكن اهمال طاقة الاضطراب V' وعندئذ تأخذ معادلة شرودينجر الشكل التالى :

$$(E^0 - \mathrm{H}^0)\,\psi^0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = 0 \qquad (23.9)$$

وبسبب انقسام الهاملتونيان H^0 إلى مجموع مؤثرين H_2 و H_1 يتعلق كل منهما بأحد المتحولين (اما r_1 أو r_2) ، فإن التابع الموجى يمكن أن يكتب فى التقريب الصفرى بالشكل التالى :

$$u = \psi_{n_1}(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_{n_2}(\boldsymbol{r}_2) \qquad (23.10)$$

وفى الحقيقة نجد بتبديل (23.10) فى (23.9) مع اعتبار (23.1) أن :

$$\begin{aligned}(E^0 - \mathrm{H}^0)u &\equiv \{E^0 - (\mathrm{H}_1 + \mathrm{H}_2)\}\,\psi_{n_1}(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_{n_2}(\boldsymbol{r}_2) = \\ &= E^0u - \{\psi_{n_2}(\boldsymbol{r}_2)\,\mathrm{H}_1\psi_{n_1}(\boldsymbol{r}_1) + \psi_{n_1}(\boldsymbol{r}_1)\,\mathrm{H}_2\psi_{n_2}(\boldsymbol{r}_2)\} = \\ &= E^0u - \{\psi_{n_2}(\boldsymbol{r}_2)\,E_{n_1}\psi_{n_1}(\boldsymbol{r}_1) + \psi_{n_1}(\boldsymbol{r}_1)\,E_{n_2}\,\psi_{n_2}(\boldsymbol{r}_2)\} = \\ &= \{E^0 - (E_{n_1} + E_{n_2})\}\,u = 0\end{aligned}$$

ومن هنا نجد قيمة الطاقة فى التقريب الصفرى ، أى أن :

$$E^0 = E_{n_1} + E_{n_2} \qquad (23.11)$$

---

* تمثل هذه المسألة مسألة ثلاثة جسيمات ولا يمكن أن تحل ضمن التقريب الكلاسيكى ولهذا تتم دراستها بواسطة نظرية الاضطراب التقريبية .

حيث E_{n_1} و E_{n_2} طاقتا الالكترونين غير المتفاعلين مع بعضهما ، ويمكن فهم هذه النتيجة بالشكل التالى : تتحدد حركة الالكترونين عندما لا يتأثران مع بعضهما $V' = 0$ بتفاعلهما مع النواة ذات الشحنة Ze_0 ، أى أن هذه الحركة تتعين تماما بمعادلة شرودينجر (23.1) التى تنتج القيم الخاصة من حلها E_{n_j} ، انظر (23.3) ، والتوابع الخاصة ψ_{n_j} وبما أن أحد الالكترونين يوجد فى الحالة n_1 والآخر فى الحالة n_2 فإن طاقتهما الكلية تساوى $E_{n_1} + E_{n_2}$ عندما $V' = 0$ ، وبسبب استقلالية حركة الالكترونين فإن تابعهما الموجى الذى له سلوك احصائى كما هو معروف يساوى جداء التابعين الموجيين الموافقين لكل من الالكترونين على حدة ، إلا أنه من السهل القبول بوجود حل آخر عن طريق التبديل المباشر فى المعادلة (23.9) ، بجانب الحل الأول (23.10) وهو التالى $\vartheta = \psi^0$ أى :

$$v = \psi_{n_2}(r_2)\,\psi_{n_1}(r_1) \qquad (23.12)$$

وهو يختلف عن الحل الأول بتبديل موضعى الالكترونين ، فالالكترون الأول يقع الآن فى الحالة n_2 والثانى فى الحالة n_1 . وهكذا نرى أنه يوجد انطباق هنا فى حالة هذه الجملة ينتج عن عدم امكانية التفريق بين الالكترونات ، ولذلك يسمى بالانطباق التبادلى حيث يتساوى التابعان u و v إذا وقع الالكترونان فى حالتين متشابهتين $n_1 = n_2$ أى أن :

$$u = v = \psi_{n_1}(r_1)\,\psi_{n_1}(r_2) \qquad (23.12a)$$

أما عندما يكون $n_1 \neq n_2$ فلا بد أن يختلف التابعان u و v ، ولهذا يجب أن نأخذ حلا صفريا لمعادلة شرودينجر يكتب كالآتى :

$$\psi^0 = C_1 u + C_2 v \qquad (23.13)$$

حيث C_1 و C_2 ثابتان اختياريان يرتبطان فيما بينهما بشرط المعايرة التالى :

$$\int \psi^{0*}\psi^0\, d^6x = 1$$

ولكى نحسب قيمتى الثابتين C_1 و C_2 ونجد سويات طاقة الجملة المضطربة يجب البحث عن E و ψ طبقا لنظرية الاضطراب بالشكل التالى :

$$\begin{aligned} E &= E^0 + E' \\ \psi &= \psi^0 + \psi' \end{aligned} \qquad (23.14)$$

ولحل المسألة نستخدم التقريب الأول لمعادلة شرودينجر (23.7) الذى يكتب فى حالتنا هذه بالشكل الآتى :

$$(E^0 - H^0)\,\psi' = -\,(E' - V')\,(C_1 u + C_2 v) \qquad (23.15)$$

وبالاستفادة من نظرية التعامد التى بموجبها يكون حل المعادلة للمسألة غير المضطربة ، متعامدا مع الطرف الأيمن للمعادلة ذات الطرف الثانى ، انظر (8.13) ، ثم باعتبار أن حلى المعادلة غير المضطربة يتمثلان بالتابعين u و v نجد أن :

$$\int u^*\,(E' - V')\,(C_1 u + C_2 v)\, d^6x = 0 \qquad (23.16)$$

$$\int v^*\,(E' - V')\,(C_1 u + C_2 v)\, d^6x = 0 \qquad (23.17)$$

وإذا بدلنا فى المعادلة (23.17) موضعى r_1 و r_2 فإن التابع ϑ ، انظر (23.12) ، يتحول للتابع u ، أنظر (23.10) ، وبالعكس ، ولا تتغير طاقة الاضطراب لأن $|r_1 - r_2| = |r_2 - r_1|$ وتأخذ المعادلة الثانيــة الشكل التالى :

$$\int u^*\,(E' - V')\,(C_2 u + C_1 v)\, d^6x = 0 \qquad (23.17a)$$

ولهذا إذا أجرينا تحويلا على المعادلة (23.16) وحدها فيمكن تعميم النتائج على (23.17a) وذلك بتغير $C_2 - C_1$ و $C_1 - C_2$. ولنبدل فى المعادلة (23.16) u و v بعبارتيهما من (23.10) و (23.12) ثم ندخل الرموز التالية :

$$\psi^*_{n_1}(r_1)\,\psi_{n_1}(r_1) = \rho_{11}(r_1) \qquad (23.18)$$

$$\psi^*_{n_2}(r_2)\,\psi_{n_2}(r_2) = \rho_{22}(r_2) \qquad (23.19)$$

$$\psi^*_{n_1}(r_1)\,\psi_{n_2}(r_1) = \rho_{12}(r_1) \qquad (23.20)$$

$$\psi^*_{n_2}(r_2)\,\psi_{n_1}(r_2) = \rho_{21}(r_2) \qquad (23.21)$$

حيث يمثل المقداران $\rho_{11}(r_1)$ ، $\rho_{22}(r_2)$ توزع الكثافة الاحتمالية فى فراغ الالكترونين الموجودين فى الحالتين n_1 و n_2 أما $\rho_{12}(r_1)$ و $\rho_{21}(r_2)$ فتعبران عما يسمى بكثافة الحالات المختلطة (أو التبادلية) عندما يقع كلا من الالكترونين فى الحالتين n_1 و n_2 بشكل جزئى ، وإذا اعتبرنا أيضا شروط التعامد والمعايرة التالية :

$$\int u^* u\, d^6x = \int \rho_{11}(r_1)\, d^3x_1 \int \rho_{22}(r_2)\, d^3x_2 = 1$$

وكذلك

$$\int u^* v\, d^6x = \int \rho_{12}(r_1)\, d^3x_1 \int \rho_{21}(r_2)\, d^3x_2 = 0$$

فإن المعادلة (23.16) تؤول إلى الشكل التالى :

(23.22)

$$E'C_1 - \left\{ C_1 e_0^2 \int \frac{\rho_{11}(r_1)\,\rho_{22}(r_2)}{|r_1 - r_2|}\, d^6x + C_2 e_0^2 \int \frac{\rho_{12}(r_1)\,\rho_{21}(r_2)}{|r_1 - r_2|}\, d^6x \right\} = 0$$

ويمثل التكامل الأول فى (23.22) طاقة التفاعل الكولونية للالكترونين ، أى

$$K = e_0^2 \int \frac{\rho_{11}(r_1)\,\rho_{22}(r_2)}{|r_1 - r_2|}\, d^6x \qquad (23.23)$$

أما التكامل الثانى فيمثل ما يسمى بالطاقة التبادلية

$$A = e_0^2 \int \frac{\rho_{12}(r_1)\,\rho_{21}(r_2)}{|r_1 - r_2|}\, d^6x \qquad (23.24)$$

المقابلة لتفاعل الالكترونين عندما يقع كل منها فى الحالة المختلطة n_1 و n_2 . ويلاحظ أنه ليس للطاقة التبادلية A ، خلافا للطاقة الكولونية K ، شبيه كلاسيكى لأنها من طبيعة كوانتية صرفة . وبالاستفادة من (23.23) و (23.24) نحصل عوضا عن (23.22) على المعادلة التالية :

$$C_1(E' - K) - C_2 A = 0 \qquad (23.25)$$

وعلى المعادلة المقابلة لـ (23.17a) إذا بدلنا فى (23.25) كما ذكرنا سابقا $C_1 \to C_2$ و $C_2 \to C_1$ أى أن :

$$C_2(E' - K) - C_1 A = 0 \qquad (23.26)$$

ومن المعادلتين الأخيرتين نجد أن :

$$1) \quad E' = K + A, \quad C_1 = C_2 \qquad (23.27)$$

$$2) \quad E' = K - A, \quad C_1 = -C_2 \qquad (23.28)$$

وطبقا لذلك نجد للتابع الموجى والطاقة الكلية ، انظر (23.13) ، الحلين التاليين :

١) الحل المتناظر

$$\psi^s = C_1(u + v) \qquad (23.29)$$

$$E^s = E^0 + K + A \qquad (23.30)$$

٢) الحل اللامتناظر*

$$\psi^a = C_1(u - v) \qquad (23.31)$$

$$E^a = E^0 + K - A \qquad (23.32)$$

ولكى نعين المعامل C_1 نستفيد من شروط المعايرة للتابعين الموجيين ψ^s و ψ^a ، أى أن :

$$\int \psi^{*c}\psi^c d^6x = \int \psi^{*a}\psi^a d^6x = 1$$

وعندئذ نجد $2C_1^2 = 1$ أو $C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ وهكذا نحصل على الحلين ψ^s و ψ^a فى شكلهما النهائى**

---

* نذكر بأن التابع u يتحول إلى v وبالعكس عند تبديل $r_1 \rightleftarrows r_2$ و $r_2 \rightleftarrows r_1$ ولهذا لا يغير التابع الموجى ψ^s اشارته نتيجة لهذه العملية (تابع متناظر) ، وفى نفس الوقت يغير التابع الموجى ψ^a اشارته (تابع لامتناظر) .

** وهنا أيضا يعنى الاضطراب الانطباقى كما فى ظاهرة شتارك ، ولهذا يأخذ المعاملان C_1 و C_2 قيما معنية فى هذه الحالة لأنهما لم يتعينا بسبب وجود الانطباق .

$$\psi^s = \frac{1}{\sqrt{2}}(u + v) \qquad (23.29a)$$

$$\psi^a = \frac{1}{\sqrt{2}}(u - v) \qquad (23.31a)$$

ويتطابق التابعان u و v كما ذكرنا سابقا عندما يقع كل من الالكترونين فى حالة كوانتية واحدة ($n_1 = n_2$) وعندئذ تتحوّل المعادلتان (23.16) و (23.17) إلى معادلة واحدة هى :

$$\int u^* (E' - V') u \, d^6x = 0 \qquad (23.33)$$

ومنه نجد أن :

$$E' = K \qquad (23.34)$$

أى أنه لا ينشأ فى هذه الحالة أى طاقة تبادلية ، وأما بالنسبة للتابع الموجى فنحصل على الحل الوحيد المتناظر التالى :

$$\psi^s = u = \psi_{n_1}(r_1)\,\psi_{n_1}(r_2) \qquad (23.35)$$

الذى يقابل طاقة الجملة ، أو

$$E^s = E^0 + K \qquad (23.36)$$

ويمكن تلخيص ما سبق : أن تطبيق نظرية الاضطراب على المسألة المدروسة يؤدى إلى أحد حلين ، إما متناظر أو لا متناظر وهو ما يتوافق تماما مع النظرية العامة لجملة الجسيمات المتطابقة .

جـ) تفاعل الالكترونات الكولونى . لنحسب عبارة الطاقة الكولونية لالكترونين يقعان فى أخفض سوياتهما ($n_1 = n_2 = 1$) ، وفى هذه الحالة تعطى طاقة كل الكترون وتابعه الموجى بالعلاقتين

$$E_1 = -\frac{Z^2 e_0^2}{2a_0}, \quad \psi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} \qquad (23.37)$$

حيث $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2}$ نصف قطر مدار بور الأول . أما طاقة التفاعل الكولونية لهذين الالكترونين فتساوى :

$$K = \int \psi_1^2(\boldsymbol{r}_1)\, \psi_1^2(\boldsymbol{r}_2) \frac{e_0^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|}\, d^6x \qquad (23.38)$$

حيث $|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\vartheta}$ و ϑ الزاوية بين المتجهين $\boldsymbol{r}_1$ و $\boldsymbol{r}_2$. وعندما نستكمل (23.38) ، يوجه المحور z بالاتجاه r_1 ، نجد بعد تبديل التابعين الموجيين ψ_1 بقيمتهما من (23.37) ثم الاستكمال بالزوايا أن :

$$K = \frac{32 Z^6 e_0^2}{a_0^6} \int_0^\infty r_1^2\, dr_1 e^{-2Zr_1/a_0} \int_{r_1}^\infty r_2 e^{-2Zr_2/a_0}\, dr_2 \qquad (23.38a)$$

ملاحظة : لقد أخذنا بعين الاعتبار عند الاستكمال بالزاوية ($x = \cos\vartheta$) ϑ العلاقة

$$I = \int_{-1}^{1} \frac{dx}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 x}} = \begin{cases} \frac{2}{r_2} & ; \quad r_1 < r_2 \\ \frac{2}{r_1} & ; \quad r_1 > r_2 \end{cases}$$

وبما أن العلاقة $\psi_1^2(r_1)\, \psi_1^2(r_2)$ متناظرة بالنسبة لـ r_1 و r_2 فيمكن عند حساب التكامل وضع r_2 بدلا من r_1 و r_1 بدلا من r_2 عندما $r_1 > r_2$ وعندئذ نجد النتيجة (23.38) نفسها عندما :

$$I = \begin{cases} \frac{4}{r_2} & ; \quad r_1 < r_2 \\ 0 & ; \quad r_1 > r_2 \,. \end{cases}$$

وبالاستكمال بالنسبة لـ r_1 و r_2 نجد أخيرا أن :

$$K = \frac{5}{8} \frac{Ze_0^2}{a_0} \qquad (23.39)$$

وباعتبار أن الطاقة الصفرية فى هذه الحالة تساوى :

$$E^0 = 2E_1 = -\frac{Z^2 e_0^2}{a_0} \qquad (23.40)$$

نجد أخيرا أن لاالكترونين يقعان فى أخفض حالة الطاقة الكلية التالية :

$$E = E^0 + K = -\frac{Z^2 e_0^2}{a_0} + \frac{5}{8} Z \frac{e_0^2}{a_0} \qquad (23.41)$$

وكمثال على تطبيق الصيغة (23.41) نحسب الآن طاقة تشرد ذرة الهليوم ، أى الطاقة اللازمة لاقتلاع الكترون واحد يقع على المدار الأول للذرة . نعرف أن طاقة ارتباط الالكترون مع النواة فى ذرة الهليوم المتشردة مرة واحدة (أى ذرة شبيهة بذرة الهيدروجين) تساوى E_1 ، انظر (23.37) ، ومنه نحسب طاقة تشرد ذرة الهليوم مرة واحدة ، أى أن :

$$E^{ion} = E_1 - E = \frac{e_0^2}{2a_0}\left(Z^2 - \frac{5}{4} Z\right) \qquad (23.42)$$

وبالنسبة للهليوم ($Z = 2$) يكون لدينا :

$$E^{ion} = 0,75 \frac{e_0^2}{a_0} \qquad (23.43)$$

أما طاقة تشرد الهليوم فهى معروفة من التجربة وتساوى

$$E^{ion}_{exp} = 0,9 \frac{e_0^2}{a_0} = 24,48 \text{ eV} \qquad (23.43a)$$

ويعود سبب هذا التباعد بين القيمتين النظرية والتجريبية إلى أن طاقة الاضطراب $K = \frac{5}{4}\frac{e_0^2}{a_0}$ ليست صغيرة بالمقارنة مع الطاقة الصفرية $|E^0| = \frac{4e_0^2}{a_0}$ (ان نسبتهما من رتبة $1/3$) ولهذا تسمح نظرية الاضطراب فى هذه الحالة بالحصول على سلسلة نتائج كيفية . أما دقة هذه الطريقة بالنسبة للحسابات الكمية فليست كبيرة بسبب امكانية مقارنة $|E^0|$ مع K .

د) طريقة التغايرات . لقد استخدمت طريقة التغايرات المطورة من قبل ريتز وهليراس بنجاح لحساب طاقة الحالات الأساسية للذرات ، ومن المعلوم أنه يمكن حساب الطاقة الوسطى بواسطة العلاقة :

$$\langle E \rangle = \int \psi^* H \psi \, d^3x \qquad (23.44)$$

فإذا كتبنا التابع الموجى بالشكل التالى :

$$\psi = \sum C_n \psi_n \qquad (23.44a)$$

حيث تمثل العوامل C_n احتمال وجود الالكترون فى الحالة n ، ويمكن أن نحسب القيمة الوسطى للطاقة فى الحالة n ، كما رأينا فى البند ٦ ، انظر (6.19) ، بالعلاقة الآتية :

$$\langle E \rangle = \sum_n |C_n|^2 E_n \qquad (23.45)$$

فإذا غيّرنا فى المجموع الأخير كل قيمة خاصة E_n بأصغر قيمة خاصة E_0 ولاحظنا أن

$$\sum_n |C_n|^2 = 1$$

فإننا نجد أن :

$$E_0 \leqslant \int \psi^* H \psi \, d^3x$$

ولذلك فإن أصغر قيمة للتكامل : $\int \psi^* H \psi \, d^3x = E^{min}$ تساعدنا على حساب الحد الأعلى لطاقة الحالة الأساسية للجملة :

$$E_0 \leqslant E^{min} \qquad (23.46)$$

وتستخدم طريقة التغايرات هذه عندما يمكن مقارنة طاقة التفاعل E' مع طاقة التقريب الصفرى E^0 لأن طريقة الاضطراب لا تعطى نتائج جيدة . ويمكن عند حل المسألة بطريقة التغايرات أن نضع على قدم المساواة فى هاملتونيان المعادلة (23.7) كلا من القسم الرئيسى وطاقة التفاعل الاضافية V' ، وبعد ذلك يجب اختيار تابع اختبار ψ كتابع للوسطاء بحيث يحسب التكامل بشكل دقيق ، وعندئذ تصبح الطاقة E تابعا لهذه الوسطاء ويجب أن تقرّب القيمة الصغرى من القيمة الحقيقية لهذا التابع ، وتتجلى الصعوبة الحقيقية لهذه الطريقة فى اختيار تابع الاختبار الذى يجب عند اختياره أن نستفيد من أى معلومات ممكنة عن الجملة ، ولا توجد طريقة معينة فى اختيار تابع الاختبار فقد تحل المسألة أحيانا عن طريق مهارة الباحث ،

أو بصورة أدق ، عن طريق بداهته الرياضية والفيزيائية ، وكثيرا ما تختار التوابع الموجية ولو شكليا لحل المعادلة المقابلة دون اضطراب . ولنحل الآن مسألة حساب أخفض حالة طاقوية لذرة الهليوم بطريقة التغايرات ، فقد أشرنا قبل قليل إلى امكانية حل هذه المسألة عن طريق نظرية الاضطراب ولهذا يمكن مقارنة نتائج الطريقتين . لقد اختار هليراس تابع الحالة الأساسية لذرة الهيدروجين (23.37) كتابع اختبار ، بعد أن غير الشحنة Z بشحنة ما فعالة Z' ، حيث Z' هى الوسيط المجهول الذى يمكن حسابه من مبدأ التغايرات ، ولذلك فإن تابع الاختبار يكتب بالشكل التالى :

$$\psi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z'}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Z' r/a_0} \qquad (23.47)$$

وهو كالتابع (23.37) معاير على الواحد لأن معايرته لا تتعلق بـ Z' ويجب أن يتضمن الهاملتونيان H فى (23.44) كلا من هاملتونيان التقريب الصفرى وطاقة الاضطراب الكمونية وعندئذ يكون :

$$H = T_1 + V_1 + T_2 + V_2 + V' \qquad (23.48)$$

حيث يعطى (T_j و V_j) ، ($j = 1, 2$) بالمساواة (23.2) أما طاقة الاضطراب الكامنة فتعطى بالعلاقة (23.5) ، فإذا اعتبرنا معايرة التوابع الموجية وأن الالكترونين يقعان فى حالة كوانتية واحدة عندما $\langle T_1 \rangle = \langle T_2 \rangle$ و $\langle V_1 \rangle = \langle V_2 \rangle$ فإننا نحسب القيمة الوسطى للهاملتونيان بالشكل التالى :

$$\langle H \rangle = 2\langle T_1 \rangle + 2\langle V_1 \rangle + \langle V' \rangle \qquad (23.49)$$

حيث :

$$\langle T_1 \rangle = \frac{1}{2m_0} \int \psi_1(\boldsymbol{r}_1) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla_1\right)^2 \psi_1(\boldsymbol{r}_1)\, d^3x_1 \qquad (23.50)$$

$$\langle V_1 \rangle = -\int \psi_1^2(\boldsymbol{r}_1) \frac{Ze_0^2}{r_1} d^3x_1 \qquad (23.50a)$$

$$\langle V' \rangle = \int \psi_1^2(\boldsymbol{r}_1)\, \psi_1^2(\boldsymbol{r}_2)\, \frac{e_0^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} d^6x \qquad (23.50b)$$

وبما أن التكامل (23.50b) متطابق تماما مع التكامل (23.38) ، عندما $Z = Z'$ ، فإننا نجد طبقا لـ (23.39) القيمة الوسطى لـ $\langle V' \rangle$ ، أى أن

$$\langle V' \rangle = \frac{5}{8} \frac{Z' e_0^2}{a_0} \quad (23.51)$$

ولكن $\langle T_1 \rangle$ فى العلاقة (23.50) هى القيمة الوسطى للطاقة الحركية لذرة الهيدروجين ذات الترتيب Z' عندما يقع الالكترون فى اخفض حالة ، غير أن القيمة الوسطى ترتبط مع القيمة المقابلة للطاقة الكلية للذرات الشبيهة بالهيدروجين بالعلاقة التالية :

$$\langle T_1 \rangle = - E_1 = \frac{Z'^2 e_0^2}{2a_0} \quad (23.52)$$

وبالطريقة نفسها تماما سنحصل على القيمة الوسطى للطاقة الكامنة للذرات الشبيهة بالهيدروجين التى تساوى ضعف الطاقة الكلية أو ($\langle V_1 \rangle = 2E_1$)

وإذا بدلنا Z بـ Z' فى الصيغة (23.50a) ، وبالتالى يمكن أن نكتب

$$\langle V_1 \rangle = \frac{Z}{Z'} 2E_1 = - \frac{ZZ' e_0^2}{a_0} \quad (23.53)$$

ومنه نحسب القيمة الوسطى للطاقة طبقا للصيغة (23.49) فنجد أن :

$$E(Z') = \frac{e_0^2}{a_0} \left(Z'^2 - 2ZZ' + \frac{5}{8} Z' \right) \quad (23.54)$$

ولنعين الآن الوسيط Z' المرافق بحيث تكون طاقة الجملة أصغر ما يمكن ، ولذلك نشتق العلاقة $E(Z')$ بالنسبة لـ Z' ونعدم المشتق فنجد أن :

$$Z' = Z - \frac{5}{16}$$

ومنه نحصل على الطاقة الصغرى لالكترونات ذرة الهليوم ، أى أن :

$$E^{min} = - \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2 \frac{e_0^2}{a_0} \quad (23.55)$$

وعندئذ تكون طاقة التشرد :

$$E^{ion} = E_1 - E^{min} = \frac{e_0^2}{2a_0}\left(Z^2 - \frac{5}{4}Z + \frac{25}{128}\right)$$

وفى الحالة الخاصة عندما $Z = 2$ يكون

$$E^{ion} \approx 0,85 \frac{e_0^2}{a_0} \qquad (23.56)$$

وهذه القيمة أقرب إلى القيمة التجريبية ، انظر (23.43a) ، من (23.43) والمحسوبة طبقا لنظرية الاضطراب . هذا وقد حصل هيلراس على توافق أكثر مع التجربة عندما أدخل عدة وسطاء تغايرية بدلا من وسيط واحد ، ولهذه النتيجة (23.55) تفسير فيزيائى بسيط وهو أن تأثير الكترون على آخر يؤدى إلى حجب الشحنة الموجبة للنواة . كما يمكن استخدام طريقة التغايرات أيضا لحساب الحد الأعلى لطاقة الكترون واحد مثار (مهيج) أو لمجموعة الكترونات مثارة . ولهذا يجب اختيار تابع الاختبار بحيث يكون متعامدًا مع كل التوابع الموجية للحالات الأكثر انخفاضا .

هـ) الحصول على معادلة شرودينجر بطريقة التغايرات . لندرس تطبيقا يعتبر من أهم تطبيقات طريقة التغايرات ، عندما يتحدد اختيار تابع الاختبار ψ أثناء بحثنا عن القيمة الوسطى لهاملتونيان جسيم واحد متحرك ، أى أن :

$$\langle E\rangle = \int \psi^* H \psi d^3x \qquad (23.57)$$

والذى يتحدد بشرط المعايرة وحده :

$$\int \psi^* \psi d^3x = 1 \qquad (23.58)$$

وبمفاضلة $\langle E \rangle$ بالنسبة لـ ψ وملاحظة هرميتية المؤثر H نجد أن :

$$\delta\langle E\rangle = \int (\delta\psi^* H\psi + \delta\psi H^* \psi^*)\, d^3x = 0 \qquad (23.59)$$

ولا يجوز اعتبار استقلال كل من $\delta\psi$ و $\delta\psi^*$ ، لأنهما يرتبطان بشرط المعايرة (23.58) ، ولكى نجعلهما مستقلين نفاضل الشرط (23.58) ، أى :

$$\int \psi\delta\psi^* d^3x + \int \psi^*\delta\psi d^3x = 0$$

ولنضرب المساواة الأخيرة بمضروب لاغرانج الثابت λ ، ونختار هذا المضروب بحيث يجعل التفاضلات $\delta\psi$ و $\delta\psi^*$ مستقلة ثم نجمع مع المساواة (23.59) ، وبما أن التفاضلات ψ و ψ^* تعتبر مستقلة الآن فيمكن أن نحصل آليا انطلاقا من مبدأ التغايرات، على معادلتى شرودينجر التاليتين :

$$(H - E)\,\psi = 0, \quad (H^* - E)\,\psi^* = 0 \qquad (23.60)$$

ويتضح عندئذ المعنى الفيزيائى للمضروب λ فهو يساوى الطاقة باشارة سالبة أى $(\lambda = -E)$ ، وهكذا نرى أن مبدأ التغايرات يؤدى إلى معادلة شرودينجر على أن نطبّق شرط المعايرة ، ويبدو من المعادلتين اللتين حصلنا عليهما أن القيم الخاصة لمعادلة شرودينجر (23.60) تعطى نهايات تكامل التغايرات ، وتدل الدراسة التفصيلية أن النهايات ستكون صغرى ، وأن طاقة الحالة الأساسية تقابل بالضرورة النهاية الصغرى المطلقة ، أى أن أصغر قيمة ممكنة للطاقة هى التى تقابل الحالة الأساسية ، كما أن حساب الحالات المهيجة يقتضى أن يحقق التابع الموجى ليس فقط شرط المعايرة وإنما شروط المعايرة والتعامد بالنسبة للتوابع الموجية للحالات الأكثر انخفاضا ، وهذا ما يتحقق آليا فى نظرية شرودينجر .

و) طريقة هارترى ـ فوك (طريقة الحقل ذاتى التناسق) أو طريقة الحساب العددى . لقد درسنا حالتين متطرفتين لتطبيق طريقة التغايرات فى حل المسائل فى الحالة الأولى ، طريقة ريتز ـ هليراس حيث أدى تطبيق هذه الطريقة على التابع الموجى إلى ايجاد « أفضل » قيم للوسطاء فى العبارة المختارة للتابع الموجى ، أما فى الحالة الثانية فلم يوضع أى شرط (سوى

شروط المعايرة) وقد أدى ذلك إلى معادلة شرودينجر . ويبدو أن هناك حالة متوسطة ، فالتابع الموجى بالرغم من أنه غير معين بعد ، فهو يساوى جداء تابعين كل منهما يتعلق فقط بالاحداثيات الخاصة بموضع الكترون واحد ، أما الشكل الواضح لهذين التابعين فيحسب عن طريق حل معادلة ما تنتج عن مبدأ التغايرات بطريقة التقريبات المتتالية . ولقد اقترح هاترى احدى هذه الطرائق عام ١٩٢٨ وقد صاغ فوك جوهر هذه الطريقة من وجهة نظر مبدأ التغايرات ، وذلك بما يلى : لنكتب مبدأ التغايرات لجسيمين فى الحالة العامة*

$$\langle E\rangle = \int \psi^*(r_1,\ r_2)\,\mathrm{H}\psi(r_1,\ r_2)\,d^3x_1 d^3x_2 = \min \qquad (23.61)$$

وكشرط اضافى يجب أن يكتب التابع الموجى العام كجداء تابعين يتعلق كل منهما باحداثيات جسيم واحد ، أى أن :

$$\psi(r_1,\ r_2) = \psi_1(r_1)\,\psi_2(r_2) \qquad (23.62)$$

ومن الضرورى أيضا اعتبار شرط المعايرة

$$\int \psi_1^*\psi_2^*\psi_1\psi_2 d^3x_1 d^3x_2 = 1 \qquad (23.63)$$

الذى يمكن أن يكتب لكل جسيم على حدة

$$\int \psi_1^*\psi_1 d^3x_1 = \int \psi_2^*\psi_2 d^3x_2 = 1$$

وبتعويض تابع الاختبار (23.62) فى عبارة الطاقة (23.61) ثم المفاضلة بالنسبة لـ ψ_1 و ψ_2 وبحل كل معادلة على حدة ، نجد أن :

$$\int \Big[(\psi_2^*\,\delta\psi_1^* + \psi_1^*\,\delta\psi_2^*)\left(\mathrm{H}_1 + \mathrm{H}_2 + \frac{e_0^2}{r_{12}}\right)\psi_1\psi_2 + $$
$$+ \psi_1^*\psi_2^*\left(\mathrm{H}_1 + \mathrm{H}_2 + \frac{e_0^2}{r_{12}}\right)(\psi_2\,\delta\psi_1 + \psi_1\,\delta\psi_2)\Big]\, d^3x_1 d^3x_2 = 0 \quad (23.64)$$

---

* وبالطريقة نفسها يمكن تعميم هذا المبدأ فى حالة ثلاثة جسيمات أو أكثر .

حيث $H_j = \frac{1}{2m_0} p_j^2 + V_j(r_j)$ هو الهاملتونيان الذى يصف حركة الكترون واحد ($j = 1, 2$) أما $\frac{e_0^2}{r_{12}}$ فيمثل طاقة الالكترونين ، ومن شرط المعايرة (23.63) نحسب العلاقات بين التفاضلات

$$\int (\delta\psi_1^*\psi_2^*\psi_1\psi_2 + \psi_1^*\delta\psi_2^*\psi_1\psi_2 + \psi_1^*\psi_2^*\delta\psi_1\psi_2 + \psi_1^*\psi_2^*\psi_1\delta\psi_2)\, d^3x_1 d^3x_2 = 0$$

وإذا ضربنا العلاقة الاخيرة بمضروب لاغرانج λ حيث $\lambda = -E$ ثم جمعناها مع (23.64) ، فيمكن اختيار المضروب λ بحيث تكون كل التفاضلات $\delta\psi_1^*$ و $\delta\psi_2^*$ . . . مستقلة . ومنه نجد معادلة هاملتون التالية :

$$\left(H_1 + \int \psi_2^* H_2 \psi_2 d^3x_2 + \int \psi_2^* \frac{e_0^2}{r_{12}} \psi_2 d^3x_2 - E\right)\psi_1 = 0$$
$$\left(H_2 + \int \psi_1^* H_1 \psi_1 d^3x_1 + \int \psi_1^* \frac{e_0^2}{r_{12}} \psi_1 d^3x_1 - E\right)\psi_2 = 0 \qquad (23.65)$$

وكذلك معادلتين متشابهتين بالنسبة للتابعين المرافقين عقديا وذلك بضرب المعادلة الأولى لـ ψ_1^* ثم استكمالها فى كل فراغ الجسيم الأول وضرب الثانية بـ ψ_2^* ثم استكمالها فى كل فراغ الجسيم الثانى ثم بأخذ نصف مجموع المعادلتين الناتجتين نجد عبارة الطاقة التالية :

$$E = \sum_j \int \psi_j^* H_j \psi_j d^3x_j + \frac{1}{2}\sum_j \sum_{j'}{}' \int \psi_j^* \psi_{j'}^* \frac{e_0^2}{r_{jj'}} \psi_j \psi_{j'} d^3x_j d^3x_{j'} \qquad (23.66)$$

مع العلم أنه عندما نتعامل مع جسيمين فقط فإن كلا من j و j' يأخذ فقط القيمتين 1 و 2 ، إلا أنه يمكن أيضا الاستفادة بنجاح من هذه المعادلة (23.66) فى حالة وجود عدد أكبر من الجسيمات . وإذا أهملنا طاقة التفاعل أى أعدنا الحدود التى تحوى e_0^2/r_{12} واعتبرنا صحة العلاقتين :

$$E = E_1 + E_2 \;, \qquad E_j = \int \psi_j^* H_j \psi_j d^3x_j$$

فإن معادلة هارترى تنقسم إلى معادلتين مستقلتين :

$$(H_j - E_j)\psi_j = 0$$

تصف كل منهما جسيما واحدا بمفرده . وبما أنه فى حل المسائل التى تحل بطريقة هارترى ، تتحرك الالكترونات (أو جسيمات أخرى) كقاعدة عامة فى حقل خارجى (فى حقل النواة مثلا) وفى حقل الالكترونات نفسها ، فقد سميت هذه الطريقة بطريقة الحقل ذاتى التناسق ، ولقد عمم فوك عام ١٩٣٠ طريقة هارترى وذلك بحساب القوى التبادلية أيضا وطبقا لما اقترحه فوك يجب أن نختار تابع الاختبار فى المعادلة الابتدائية (23.61) باعتبار صحة مبدأ باولى ، ولهذا يحدد صنف التوابع الموجية أيضا باضافة شرط جديد هو شرط اللاتناظر (وسندرس بشكل أكثر تفصيلا اختيار التوابع اللامتناظرة التى تحقق مبدأ باولى فى البند المقبل) . هذا وبحل جملة معادلات هارترى (وكذلك معادلات فوك) للغمامات الالكترونية للذرات بطريقة التقريبات المتتالية ، حيث يحسب أولا التابع الموجى للتقريب الصفرى (باهمال التفاعل بين الالكترونات) ثم تؤخذ بعين الاعتبار طاقة التفاعل بين الالكترونات ، نحصل على معادلة التقريب الأول ، وبعد ذلك نضع الحل الناتج عن التقريب الأول فى معادلة هارترى - فوك فنجد التقريب الثانى وهكذا . . . ويتم تكرار هذا الحساب حتى تتساوى الحلول المتوالدة من بعضها أى نحصل على الحل ذاتى التناسق . ونلاحظ أن الحل الفعال لهذه المسألة ممكن فقط بالطرائق العددية للتكاملات ، وبواسطة الحسابات المعاصرة أمكن حساب الطاقة والتابع الموجى ليس للعناصر الخفيفة وحدها وإنما للعناصر الثقيلة أيضا . هذا وتطبق طريقة أخرى لدراسة الذرات الثقيلة غير الطريقة التى شرحناها وهى طريقة توماس - فيرمى الاحصائية التى بالرغم من أنها غير دقيقة كطريقة هارترى - فوك ، لكنها تسمح بالكشف بطريقة بسيطة عن كثير من قوانين الذرات الثقيلة ، وسنستخدم هذه الطريقة فى أبحاثنا المقبلة ، وسنراها فى البند ٢٥ عند دراستنا نظرية جدول مندلييف للتصنيف الدورى للعناصر .

ز) دراسة الطاقة التبادلية . سنفسر الآن ببعض التفصيل المعنى الفيزيائى للطاقة التبادلية (23.64) التى حصلنا عليها سابقا ، تلك الطاقة التى تمثل كما أشرنا سابقا متوسط قيمة طاقة التفاعل الكولونية للالكترونين عندما يقعان فى الحالات المختلطة ، أى يقعان جزئيا فى الحالتين n_1 و n_2 وطبقا للصيغ (23.30) و (23.32) ترتبط الطاقة الكلية للجملة مع الطاقة الكولونية والطاقة التبادلية A بالعلاقة :

$$E = E^0 + K \pm A \qquad (23.67)$$

مع العلم أن الاشارة الموجبة تقابل التابع ψ^s والسالبة تقابل التابع ψ^a . ولكى نفهم الطاقة التبادلية بشكل مفصل ندرس سلوك الجملة عندما يتغير الزمن ولهذا نكتب التابعين الموجبين للحالتين المتناظرة واللامتناظرة بالشكل التالى :

$$\psi^s(t) = \psi^s e^{-\frac{i}{\hbar}E^s} \quad , \quad \psi^a(t) = \psi^a e^{-\frac{i}{\hbar}E^a t} \qquad (23.68)$$

وإذا فرضنا

$$\frac{E_0 + K}{\hbar} = \omega, \quad \frac{A}{\hbar} = \delta \qquad (23.69)$$

فإنه يمكن كتابة (23.68) بالشكل التالى :

$$\psi^s(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(u + v)\, e^{-i\omega t - i\delta t}$$
$$\psi^a(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(u - v)\, e^{-i\omega t + i\delta t} \qquad (23.70)$$

ولندرس حالة جملة موصوفة بتراكب التابعين $\psi^s(t)$ و $\psi^a(t)$ من الشكل* :

---

* هذا التركيب للحالتين المتناظرة واللامتناظرة ممكن فقط عند اهمال مغزل الجسيمات وعندما لا يوجد اختلاف فيزيائى بينهما ، أما عند وجود المغزل فتقابل الحالة المتناظرة مغزلا يساوى الصفر كما تقابل الحالة اللامتناظرة مغزلا يساوى الواحد ، انظر البند ٢٤ ، ولهذا سيكون لهذا المزج (23.71) بين الحالتين صيغة شكلية فقط ، هذا بالاضافة إلى حظر الانتقال المتضمن تغير المغزل .

$$\Psi(t) = C^s\psi^s(t) + C^a\psi^a(t) \qquad (23.71)$$

وليس من الصعب التأكد بأن التابع $\Psi(t)$ يمثل الحل العام لمعادلة شرودينجر (23.7) ضمن التقريب الأول لنظرية الاضطراب . ولنفرض الآن أنه فى لحظة البدء ($t = 0$) كان الالكترون الأول فى الحالة n_1 والثانى فى الحالة n_2 وعندئذ يجب أن يتطابق التابع التالى :

$$\Psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{(C^s + C^a)\, u + (C^s - C^a)\, v\} \qquad (23.72)$$

مع التابع u ومنه نجد :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(C^s + C^a) = 1, \qquad C^s - C^a = 0$$

أو :

$$C^s = C^a = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad (23.73)$$

ومن المساوتين الأخيرتين نجد للتابع (23.71) القيمة التالية :

$$\Psi(t) = e^{-i\omega t}\{u\cos\delta t - iv\sin\delta t\} = e^{-i\omega t}\{C_u u + C_v v\} \qquad (23.74)$$

حيث

$$C_u = \cos\delta t, \qquad C_v = -\,i\sin\delta t \qquad (23.75)$$

ومن الواضح أن السعتين C_u و C_v تحققان شرط المعايرة التالى :

$$|C_u|^2 + |C_v|^2 = 1 \qquad (23.76)$$

هذان الثابتان يمثلان احتمال وجود الجملة بحيث توصف بالتابع u أو بالتابع v . وعندما $t = 0$ نجد $C_v = 0$ و $C_u = 1$ وهذا يعنى أن الجملة تقع فى بدء الزمن فى حالة موصوفة بالتابع u إلا أنه بعد زمن ما :

$$\tau = \frac{\pi}{2\delta} \quad (23.77)$$

سيساوى العاملان C_u و C_v طبقا للعلاقة (23.75) ما يلى :

$$C_u = 0 \quad , \quad C_v = -i$$

أى أن حالةالجملة لا توصف الآن بالتابع u وإنما بالتابع v ، وهذا يعنى أنه إذا كان أحد الالكترونين موجودا فى اللحظة $t = 0$ فى الحالة n_1 والآخر فى الحالة n_2 ، فإنه بعد مرور الزمن t سيقع الأول فى الحالة n_2 والثانى فى الحالة n_1 . ويسمى الزمن t الذى يتغير خلاله موضعا الالكترونين بزمن التغير ، وهو يرتبط مع الطاقة المتبادلة بالعلاقة البسيطة التالية :

$$\tau = \frac{\pi}{2\delta} = \frac{\pi\hbar}{2A} \quad (23.78)$$

وفى الحالة الخاصة عندما تنعدم الطاقة المتبادلية ($A = 0$) يصبح الزمن لا نهائيا ($\tau = \infty$) . وفى الختام نشير إلى أن الطاقة المتبادلة لا تلعب دورًا هامًا إلا عندما تتداخل التوابع الموجية ومعها الكثافة الاحتمالية للسويات المختلفة مع بعضها بعضا* . وإذا لم يكن تداخل التوابع ذا قيمة فستنعدم الطاقة المتبادلية ، وهذا ما يذكرنا بانتقال الطاقة من هزاز مرتبط إلى آخر . فمن المعلوم أنه إذا بدأ أحد الهزازات المرتبطة بالاهتزاز فإنه بعد فترة من الزمن ستنعدم سعته . لأنه يعطى كل طاقة اهتزازه إلى الهزازات الأخرى ، وعندئذ سيتوقف زمن تبادل الطاقة على النسبة بين تواترات اهتزازاتها الذاتية ويأخذ الزمن قيمة عظمى عندما يتطابق التواتران (حالة الرنين) ، ويجب التأكيد على أن هذا التشابه ظاهرى صرف ولا يتحقق إلا بوجود الصفات الموجية للظاهرتين .

---

* تدل الحسابات أن زمن التغير فى ذرة الهليوم فى الحالتين 1s و 2s هو فى حدود $10^{-15}s$. أما إذا وقع الالكترون الثانى فى الحالة 10s فلا تتداخل التوابع الموجية فى الواقع ، ويمتد زمن التغير حتى سنين أى عمليا حتى اللانهاية .

البند ٢٤ ـ وجود المغزل فى الذرات الشبيهة بالهليوم

أ) الحالات المتناظرة واللامتناظرة . ان للنظرية الكوانتية لمجموعات جسيمات متطابقة سلسلة خواص نوعية ليس لها شبيه كلاسيكى كما أشرنا سابقا ، وترتبط الخاصة الأساسية بمبدأ تطابق الجسيمات الذى بموجبه لا تتغير حالة الجملة عند تبديل مكان الجسيمات ، ولندرس ظهور هذه الخاصة على أبسط جسيمين متطابقين وهذا ما يعتبر أبسط مثال على ذلك. وسنميز حالة الجسيم ذى نصف القطر الشعاعى r بثلاثة أعداد كوانتية فراغية (n ـ الأساسى ، l ـ المدارى ، m ـ المغناطيسى) نرمز لها اختصارا بالرمز n أما الرابع فهو العدد الكوانتى المغزلى s ويكتب التابع الموجى طبقا لهذه الرموز المختصرة بالشكل التالى :

$$\Psi(n_1, s_1, r_1; n_2, s_2, r_2) \qquad (24.1)$$

حيث ينسب الوسيطان 1 و 2 إلى الجسيم الأول والجسيم الثانى على الترتيب . ولنفرض الآن مؤثرا P ينحصر تأثيره على التابع الموجى فى تبديل مواضع الأعداد أو الكوانتية n_1, s_1 ، n_2, s_2 للجسمين* أى

$$P\Psi(n_1, s_1, r_1; n_2, s_2, r_2) = \Psi(n_2, s_2, r_1; n_1, s_1, r_2) \qquad (24.2)$$

وليس من الصعب حساب القيم الخاصة لهذا المؤثر بالشكل التالى :

$$P\Psi(n_1, s_1, r_1; n_2, s_2, r_2) = \lambda\Psi(n_1, s_1, r_1; n_2, s_2, r_2) \qquad (24.3)$$

وفى الحقيقة ان تطبيق المؤثر مرتين كما ينتج من (24.2) يجب أن يؤدى إلى عودة الجملة إلى حالتها الأولى ، أى أن :

---

* وهذا مكافئ لتبديل الجسيمين ببعضهما .

$$P^2\Psi(n_1, s_1, \boldsymbol{r}_1; n_2, s_2, \boldsymbol{r}_2) = \Psi(n_1, s_1, \boldsymbol{r}_1; n_2, s_2, \boldsymbol{r}_2) \quad (24.4)$$

ومن جهة أخرى نجد من (24.3) أن :

$$P^2\Psi(n_1, s_1, \boldsymbol{r}_1; n_2, s_2, \boldsymbol{r}_2) = \lambda^2\Psi(n_1, s_1, \boldsymbol{r}_1; n_2, s_2, \boldsymbol{r}_2) \quad (24.5)$$

وهكذا تساوى القيمة الخاصة لمؤثر التبديل :

$$\lambda = \pm 1 \quad (24.6)$$

وتعنى هذه النتيجة أن تغيير موضعى الجسيمين يؤدى إلى أحد أمرين ، الأول : لا يتغير فيه التابع الموجى ($\lambda = 1$) وتسمى مثل هذه التوابع بالمتناظرة

$$\Psi^s(n_1, s_1, \boldsymbol{r}_1; n_2, s_2, \boldsymbol{r}_2) = \Psi^s(n_2, s_2, \boldsymbol{r}_1; n_1, s_1, \boldsymbol{r}_2) \quad (24.7)$$

والثانى : يتغير فيه التابع الموجى $\lambda = -1$ (تسمى مثل هذه التوابع باللامتناظرة)

$$\Psi^a(n_1, s_1, \boldsymbol{r}_1; n_2, s_2, \boldsymbol{r}_2) = -\Psi^a(n_2, s_2, \boldsymbol{r}_1; n_1, s_1, \boldsymbol{r}_2) \quad (24.8)$$

وتؤكد الميكانيكا الكوانتية أن جملة الجسيمات المتطابقة لا يمكن أن تتواجد إلا فى أوضاع ذات نوع معين من التناظر ، وبصورة خاصة تتحقق فى الطبيعة أما حالات متناظرة (التابع الموجى متناظر) ، أو حالات غير متناظرة (التابع الموجى لامتناظر) .

ب) احصاء فيرمى - ديراك واحصاء بوزى - اينشتين . من المعلوم أن الجسيمات المتطابقة تنقسم إلى صنفين رئيسيين يكون لكل منهما خواص احصائية مختلفة وهذا الاختلاف يعود بصورة رئيسية إلى مغزل الجسيمات ، ويبدو أن الجسيمات ذات المغزل $s = {}^1/_2, {}^3/_2, \ldots$ (بوحدات ثابت بلانك h) تخضع لاحصاء فرمى - ديراك (فيرميونات) ومنها الالكترونات والبروتونات والنترونات والميزونات μ (مغزل كل منها يساوى ${}^1/_2$). وخلافا لهذه الفيرميونات توجد جسيمات مغزلها $s = 0, 1, \ldots$

تخضع لاحصاء بوزى ـ اينشتين (بوزونات) وينسب لهذا النوع الجسيمات ، الميزونات ـ p والميزونات ـ k (مغزلها يساوى الصفر) والفوتونات (مغزلها يساوى الواحد) إلى آخره . وبغض النظر عن تحليل الخواص الاحصائية للجسيمات سنشير إلى أنه فى احصاء بوزى ـ اينشتين يمكن أن يقع فى كل حالة كوانتية أى عدد من الجسيمات (دون تحديد) أما فى احصاء فيرمى ـ ديراك فلا يمكن أن يقع فى حالة موصوفة بأربعة أعداد كوانتية أكثر من جسيم واحد ، وقد اكتشف هذه الخاصة المميزة للفوتونات تجريبيا العالم باولى عام ١٩٢٣ حتى قبل ظهور الاحصاء الكوانتى وعرف بمبدأ باولى ، ولكى نوجد العلاقة بين تناظر الحالة والاحصاء ندرس جملة مؤلفة من جسيمين يوصف كل منهما بأحد التابعين

$$\psi_{n_1s_1}(r_1) \quad , \quad \psi_{n_2s_2}(r_2)$$

ولوصف الفيرميونات يجب أن نؤلف من هذين التابعين حلالامتناظرا*

$$\Psi^a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{n_1s_1}(r_1)\, \psi_{n_2s_2}(r_2) - \psi_{n_2s_2}(r_1)\, \psi_{n_1s_1}(r_2)\right) \qquad (24.9)$$

لأن الحالة التى تكون فيها لكل من الجسيمين نفس الأعداد الكوانتية

$$n_1 = n_2, \qquad s_1 = s_2 \ . \qquad (24.10)$$

تصبح محظورة بسبب انعدام التابع الموجى

$$\Psi^a (n_1,\ s_1,\ r_1;\ n_1,\ s_1,\ r_2) = 0 \qquad (24.11)$$

وهذا ما يتوافق تماما مع مبدأ باولى ، أما بالنسبة للبوزونات فيجب أن تأخذ الحل المتناظر :

$$\Psi^s = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{n_1s_1}(r_1)\, \psi_{n_2s_2}(r_2) + \psi_{n_2s_2}(r_1)\, \psi_{n_1s_1}(r_2)\right) \qquad (24.12)$$

---

* بفرض أن التابعين $\psi_{n_1s_1}$ و $\psi_{n_2s_2}$ متعامدان ومعايران على الواحد ولهذا وضعنا $\frac{1}{\sqrt{2}}$ كمعامل معايرة للتابع Ψ^a .

وهذا لا يمنع وجود الجسيمين فى حالة كوانتية واحدة ، انظر (24.10) ، لأن

$$\Psi^{s}(n_1, s_1, r_1; n_1, s_1, r_2) \neq 0 \qquad (24.13)$$

جـ) رابطة رسيل ـ ساوندرس والرابطة ـ jj . بما أننا سنتعامل فيما يلى مع الكترونين فيجب أن نستعمل لدراستهما الحل اللاتناظرى (24.9) ، ومن أهم المسائل التى تنتج عن ذلك هى مسألة جمع أربعة عزوم : اثنان مداريان (l_1, l_2) واثنان مغزليان (s_1, s_2) وليست هناك أية مشكلة فيما يخص هذه المسألة فى النظرية الكلاسيكية ولكن الأمر لا يبدو كذلك فى النظرية الكوانتية « ! » فطبقا للنموذج الشعاعى يجب أن تجمع المتجهات حسب زوايا معينة بحيث يساوى المجموع الهندسى قيما صحيحة أو نصف صحيحة بحسب ما يكون المجموع الجبرى صحيحا أو نصف صحيح ولهذا يمكن اجراء عملية الجمع بطريقتين :

من الممكن أولا جمع كل العزوم المدارية المغزلية لوحدها (يجب أن نحصل على أعداد صحيحة)

$$L = l_1 + l_2 \qquad (24.14)$$

$$S = s_1 + s_2 \qquad (24.15)$$

ثم نحسب العزم الكلى (عدد صحيح) :

$$J = L + S \qquad (24.16)$$

نسمى مثل هذه الرابطة : الرابطة ـ SL أو برابطة رسيل ـ ساوندرس . وهى تفترض وجود قانونى مصونية مستقلين احدها للعزوم المدارية ، انظر (24.14) ، والثانى للعزوم المغزلية ، انظر (24.15) ، وتتحقق هذه الرابطة أكثر ما يمكن فى العناصر الخفيفة . ومن الممكن استخدام مخطط آخر للجمع : نجمع أولا العزم المدارى والعزم المغزلى لكل من الألكترونين (قيم نصف صحيحة)

$$j_1 = l_1 + s_1 \quad (24.17)$$

$$j_2 = l_2 + s_2 \quad (24.18)$$

ثم نحسب العزم الكلى للالكترونين معا (قيم صحيحة)

$$J = j_1 + j_2. \quad (24.19)$$

وهذا ما يسمى بالرابطة - jj التى تطبق أكثر ما يمكن على العناصر الثقيلة ، ومن الواضح أن المجموعين الكليين للعزوم فى الحالتين مختلفان طبقا للهندسة الكوانتية

$$L + S \neq j_1 + j_2 \quad (24.20)$$

ويتوقف تحقق أى من الرابطتين السابقين على النسبة بين الطاقة الكولونية وطاقة التفاعل المدارى المغزلى للالكترونين فيما تعطى طاقة التفاعل الكولونية لالكترونين ، انظر (23.39) ، بالعلاقة التالية :

$$K = e_0^2 \int \frac{\rho_{11}(r_1)\,\rho_{22}(r_2)\, d^6x.}{|r_1 - r_2|} \sim ZR\hbar \quad (24.21)$$

أما طاقة التفاعل المغزلى المدارى ، انظر (20.9) ، فتساوى :

$$E^{s.o.} = \frac{Ze_0^2}{2m_0^2c^2} \left\langle (\mathbf{LS}) \frac{1}{r^3} \right\rangle \sim R\,\hbar\, Z^4 \alpha^2 \quad (24.22)$$

وهى أصغر بكثير من الطاقة الكولونية عندما $Z = 2$ ولهذا تتحقق رابطة رسيل - ساوندرس فى ذرة الهليوم ، ويتضح من الصيغة الأخيرة أن التفاعل المغزلى المدارى يزداد بقوة عند ازدياد شحنة النواة Z ($\sim Z^4$) (العناصر الثقيلة) وبالتالى يمكن أن تزيد طاقة التفاعل المغزلى المدارى عن الطاقة الكولونية ، وفى هذه الحالة تتحقق الرابطة - jj .

د) التابع الموجى لذرة الهليوم بوجود المغزل . لندرس بالتفصيل التابع الموجى لذرة الهليوم حيث يجب أن يحمل تفاعل العزوم المغزلية والمدارية ميزات رابطة رسيل - ساوندرس ، وبما أنه فى هذه الحالة تجمع

العزوم المدارية المغزلية كل على حدة ، فيمكن للتابع الموجى أن يكتب بشكل جداء قسمين الأول تابع لمغزل الجسيمات والثانى تابع لاحداثياتها ، ولنعتبر أن التابع الموجى يجب أن يكون لامتناظرا بالنسبة لتبديل الأعداد الكوانتية الأربعة :

$$\Psi = C(s_1, s_2)\,\psi_{n_1n_2}(r_1, r_2) = -C(s_2, s_1)\,\psi_{n_2n_1}(r_1, r_2) = -C(s_2, s_1)\,\psi_{n_1n_2}(r_2, r_1) \quad (24.23)$$

وهكذا يكون تبديل الاحداثيات مكافئا لتبديل ثلاثة أعداد كوانتية فراغية فقط لا أربعة (فراغية مغزلية) وهذا يتحقق فى حالتين الأولى أن يكون التابع متناظرا بالنسبة للمغازل وغير متناظر بالنسبة للاحداثيات ، والثانية أن يكون التابع متناظرا بالنسبة للاحداثيات وغير متناظر بالنسبة للمغازل ، ولهذا نحصل على نموذجى الحل التاليين* :

$$\Psi^s = C^s(s_1, s_2)\,\psi^a_{n_1n_2}(r_1, r_2) \quad (24.24)$$

$$\Psi^s = C^a(s_1, s_2)\,\psi^s_{n_1n_2}(r_1, r_2) \quad (24.25)$$

مع العلم أننا حصلنا على القسم الاحداثى من التابع الموجى ، انظر البند ٢٣ ، عندما $n_1 \neq n_2$ ويكون :

$$\psi^s_{n_1n_2}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(u + v) \quad (24.26)$$

$$\psi^a_{n_1n_2}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(u - v) \quad (24.27)$$

حيث

$$u = \psi_{n_1}(r_1)\,\psi_{n_2}(r_2)$$
$$v = \psi_{n_1}(r_2)\,\psi_{n_2}(r_1) \quad (24.28)$$

ولنبحث الآن عن القسم المغزلى التابع الموجى لالكترونين ، فى حالة رابطة رسيل - ساوندرس تجمع العزوم المغزلية بالاستقلال عن المدارية ، ونختار

---

* يكون كل من التابعين Ψ^s و Ψ^a لا متناظرا بالنسبة لتبديل أربعة أعداد كوانتية ، وفى حالتنا هذه يعكس هذا الاختيار ميزات التناظر بالنسبة للاحداثيات الفراغية .

التوابع المغزلية لكل من الالكترونين كتوابع خاضعة لمؤثر المغزل على z .

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_3 \qquad (24.29)$$

ولمؤثر مربع العزم المغزلى :

$$S^2 = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2) \qquad (24.30)$$

حيث نكتب مصفوفات باولى ثنائية الأسطر σ بدون شرطة ، انظر (16.26) ، أى أن :

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

وهكذا يحقق التابع المغزلى لجسيم واحد $C = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ المعادلتين التاليتين :

$$S_z C = \frac{\hbar}{2}\sigma_3 C = \frac{\hbar}{2}\sigma_3 \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \hbar\lambda_1 \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \qquad (24.31)$$

$$S^2 C = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2)\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \hbar^2\lambda_2 \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \qquad (24.32)$$

فإذا اعتبرنا أن $\sigma_1^2 = 1$ ، فيمكن أن نحسب λ_2 من المعادلة (24.32) حيث نجد $\lambda_2 = {}^3/_4$، أما المعادلة المصفوفية (24.31) لحساب λ_1 فهى مكافئة لمجموعة معادلتين جبريتين ولذلك :

$$\begin{aligned} c_1({}^1/_2 - \lambda_1) &= 0 \\ c_2({}^1/_2 + \lambda_1) &= 0 \end{aligned} \qquad (24.33)$$

إذ ينتج منهما الحلان المقابلان لامكانيتى توجيه المغزل بالنسبة لـ z وهما :

١) $\lambda_1 = {}^1/_2$ ، $c_1 = 1$ ، $c_2 = 0$

وهنا يتوجه المغزل باتجاه المحور z ويكون للتابع المغزلى المقابل للقيمة الخاصة ${}^1/_2$ الشكل التالى :

$$C({}^1/_2) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad (24.34)$$

$c_2 = 1$ ، $c_1 = 0$ ، $\lambda_1 = -{}^1/_2$ (٢

وفى هذه الحالة يتوجه المغزل بعكس اتجاه المحور z ويساوى التابع الموجى المقابل :

$$C(-{}^1/_2) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (24.35)$$

ويدل ما بين القوسين فى الحلين (24.34) و (24.35) على قيمة مسقط المغزل على z ، وليس من الصعب التأكد أن الاقسام المغزلية من التابع الموجى تحقق شرط التعامد والتعاير ، وفى الحقيقة إذ اعتبرنا أن المرافق ، (أو بعبارة أدق المرافق الهرمينى) للتابع المغزلى المصفوفة ذات السطر الواحد :

$$C^+ = (c_1^* c_2^*)$$

لذا ، فإنه ينتج من (24.34) و (24.35) أن :

$$C^+({}^1/_2)\,C({}^1/_2) = C^+(-{}^1/_2)\,C(-{}^1/_2) = 1$$

$$C^+({}^1/_2)\,C(-{}^1/_2) = 0$$

أما تأثير مصفوفة باولى على التابعين المغزليين (24.34) و (24.35) فيكون كما يلى :

$$\sigma_1 C(\pm{}^1/_2) = C(\mp{}^1/_2), \qquad \sigma_2 C(\pm{}^1/_2) = \pm iC(\mp{}^1/_2)$$
$$\sigma_3 C(\pm{}^1/_2) = \pm C(\pm{}^1/_2) \qquad (24.36)$$

وعند وجود الكترونين فسيعطى كل من مؤثر مسقط المغزل الكلى على z ومؤثر مربع المغزل الكلى بالعلاقتين على الترتيب :

$$S_z = S'_z + S''_z = {}^1/_2\hbar\,(\sigma'_3 + \sigma''_3) \qquad (24.37)$$
$$S^2 = \hbar^2\,({}^3/_2 + {}^1/_2\,(\sigma'\sigma'')) \qquad (24.38)$$

وهنا تعنى الشرطة والشرطتان الموضوعتان على مصفوفات باولى أن هذه المصفوفات يجب أن تؤثر على التوابع المغزلية الموافقة للالكترون الأول $(C'(\pm{}^1/_2))$ وللالكترون الثانى $(C''(\pm{}^1/_2))$ ، ويمكن تأليف ثلاثة تراكيب

متناظرة من التابعين المغزليين للالكترونين هى :

$$C_1^s = C'(^1/_2)\, C''(^1/_2)$$
$$C_2^s = C'(-^1/_2)\, C''(-^1/_2) \qquad (24.39)$$
$$C_3^s = \frac{1}{\sqrt{2}}\, [C'(^1/_2)\, C''(-^1/_2) + C'(-^1/_2)\, C''(^1/_2)]$$

وتركيب واحد لامتناظر هو التالى :

$$C^a = \frac{1}{\sqrt{2}}\, [C'(^1/_2)\, C''(-^1/_2) - C'(-^1/_2)\, C''(^1/_2)] \qquad (24.40)$$

ولايجاد اتجاه المغزل بالنسبة للمحور z نؤثر بالمؤثر (24.37) على التوابع المغزلية المتناظرة ، وبالاستفادة من (24.36) نجد أن :

$$S_z C_1^s = \hbar C_1^s \qquad (24.41)$$
$$S_z C_2^s = -\hbar C_2^s \qquad (24.42)$$
$$S_z C_3^s = 0 \qquad (24.43)$$

أى أن المغزلين فى الحالة C_1^s يتجهان باتجاه المحور z (↑↑) ولكنهما يتجهان بعكس المحور z (↓↓) فى الحالة C_2^s وهما يتعامدان مع المحور z (⇉) فى الحالة C_3 ، ولحساب القيمة المطلقة للمغزل الكلى نستفيد من العلاقة التى يمكن الحصول عليها بملاحظة (24.36) وهى :

$$S^2 C_{1,2,3}^s = \hbar^2 [^3/_2 + {}^1/_2 (\sigma'\sigma'')]\, C_{1,2,3}^s = \hbar^2 S(S+1)\, C_{1,2,3}^s \qquad (24.44)$$

حيث $S = 1$ ، أى أن المغزل الكلى للحالة المتناظرة يساوى الواحد (مغزلا الالكترونين متوازيان) ، ويمكن الحصول على المتساويات (24.41) - (24.44) بملاحظة (24.36) حسب المخطط التالى :

$$(\sigma_3' + \sigma_3'')\, C_1^s = C''(^1/_2)\, \sigma_3' C'(^1/_2) + C'(^1/_2)\, \sigma_3'' C''(^1/_2) = 2C'(^1/_2)\, C''(^1/_2) = 2C_1^s$$
$$(\sigma'\sigma'')\, C_1^s = \sigma_1' C'(^1/_2)\, \sigma_1'' C''(^1/_2) + \sigma_2' C'(^1/_2)\, \sigma_2'' C''(^1/_2) +$$
$$+ \sigma_3' C'(^1/_2)\, \sigma_3'' C''(^1/_2) = C'(-^1/_2)\, C''(-^1/_2) - C'(-^1/_2)\, C''(-^1/_2) +$$
$$+ C'(^1/_2)\, C''(^1/_2) = C_1^s \qquad (24.45)$$

ويمكن البرهان عند تأثير المؤثرات المغزلية على التركيب المغزلى اللامتناظر (24.40) بطريقة مشابهة ، أى أن :

$$S^2C^a = \hbar^2 (3/2 + 1/2 (\sigma'\sigma''))\, C^a = 0 \qquad (24.46)$$

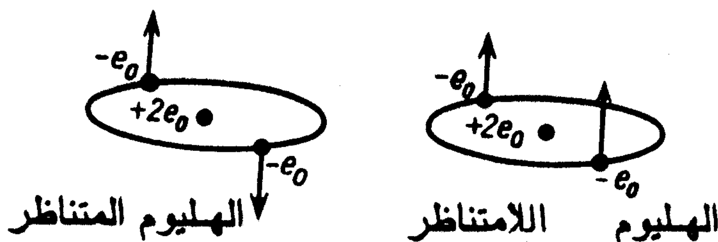
$$S_zC^a = 0 \qquad (24.47)$$

أى أن الوضع المغزلى اللامتناظر عندما يتعاكس اتجاه مغزلى الالكترونين يوصف بالحالة C^a ويوجد حل وحيد متناظر عندما يقع كلا من الالكترونين فى نفس الحالة الكوانتية ($n_1 = n_2$) ، انظر الملاحظة المتعلقة بالصيغة (24.24) ، وهذا الحل هو التالى :

$$\Psi^s_- = C^a (s_1, s_2)\, \psi^s \qquad (24.48)$$

$$\psi^s = u = \psi_{n_1}(r_1)\, \psi_{n_1}(r_2) \qquad (24.49)$$

هـ) الهليوم المتناظر والهليوم اللامتناظر . لقد حصلنا على التوابع الموجية التى تميز مجموعتين من الحالات فى الأولى (الهليوم المتناظر) يكون التابع الموجى متناظرا بالنسبة لتبديل الاحداثيات ، انظر (24.24) ، والمغزل الكلى يساوى الصفر ، وفى الثانية (الهليوم اللامتناظر) يكون التابع الموجى لامتناظرا بالنسبة لتبديل الاحداثيات ،انظر (24.1) ، أما المغزل الكلى فيساوى الواحد (الشكل ٢٤ ـ ١) ، ونلاحظ انغلاق كل من



الشكل ٢٤ ـ ١ . توجه مغازل الالكترونات فى ذرة الهليوم .

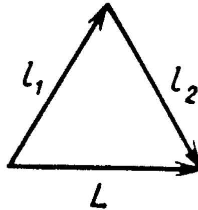
النوعين السابقين بمعنى أن أى منهما لا يتحول إلى الآخر ، ويمكن التأكد من ذلك بالحساب المباشر : إذ لو حسبنا عنصر المصفوفة الموافق لانتقال ثنائى الأقطاب من الهليوم المتناظر إلى الهليوم اللامتناظر فى ذرة الهليوم (يتناسب عزم ثنائى الأقطاب للجملة مع $r_1 + r_2$) لوجدنا أن :

$$\begin{aligned} \langle r_{c.\,a} \rangle &= \int \psi^{*s}(r_1, r_2)(r_1 + r_2)\psi^{a}(r_1, r_2)\, d^6x = \\ &= \int \psi^{*s}(r_2, r_1)(r_2 + r_1)\psi^{a}(r_2, r_1)\, d^6x = \\ &= -\int \psi^{*s}(r_1, r_2)(r_1 + r_2)\psi^{a}(r_1, r_2)\, d^6x \qquad (24.50) \end{aligned}$$

وهو يساوى الصفر لأن*

$$\langle r_{s.\,a} \rangle = -\langle r_{s.\,a} \rangle = 0 \qquad (24.51)$$

و) **الطيف الطاقوى لذرة الهليوم** . ان العزم المدارى العام L (الذى حصلنا عليه نتيجة لجمع العزمين المدارين للالكترونين l_1 و l_2 رابطة رسيل ـ ساوندرس) يجب أن يأخذ قيما صحيحة ، وفى الحالة الخاصة عندما $l_1 = l_2 = 1$ (يقع كلا الالكترونين فى الحالة ـ p) ويمكن للعزم المدارى الكلى أن يساوى $L = 2, 1, 0$. وهذا ما يوافق جمع العزوم حسب النموذج التالى :



* لقد أجرينا تغيرا فى متحولات التكامل فى (24.50) واستفدنا من خاصة تناظر التوابع الموجية .

1) $L = 2$ يكون العزمان متوازيين $l_1 \uparrow\uparrow l_2$ ، $L = l_1 + l_2 = 2$.

2) $L = 1$ يتوضع العزمان بحيث تكون الزاوية بينهما 60°: $L = l_1 + l_2 - 1 = 1$.

3) $L = 0$ العزمان متعاكسان $l_1 \uparrow\downarrow l_2$ ، $L = l_1 - l_2 = 0$.

وفى الحالة العامة عندما $l_1 \geqslant l_2$ يأخذ L جميع القيم الممكنة التالية :

$$L = l_1 + l_2,\quad l_1 + l_2 - 1,\quad l_1 + l_2 - 2,\ \ldots,\quad l_1 - l_2 \qquad (24.52)$$

وخلافا للذرات الشبيهة بالهيدروجين يرمز لحدود الذرات المركبة ذات العزم المدارى المعين بحروف لاتينية كبيرة :

الحالة S	$L = 0$
الحالة P	$L = 1$
الحالة D	$L = 2$
الحالة F	$L = 3$

أما كثرة هذه الحدود فتتعين طبقا للنموذج الشعاعى بعدد القيم التى يمكن أن يأخذها العزم الكلى لكمية الحركة من أجل القيمة L المعطاة :

$$J = L + S,\quad L + S - 1,\ \ldots,\ |L - S| \qquad (24.53)$$

ومنه نجد أن عدد هذه القيم عندما $L \geqslant S$

$$\nu = 2S + 1 \qquad (24.54)$$

وعندما $L < S$ يكون

$$\nu = 2L + 1 \qquad (24.55)$$

ولهذا يجب أن تكون جميع سويات الهليوم المتناظر $S = 0$ أحادية $J = L$ ، $\nu = 1$ ويجب أن نحدث ظاهرة زيمان العادية فى أى حقل مغناطيسى ، أما بالنسبة للهليوم اللامتناظر $S = 1$ فيجب أن تكون السويات ، كقاعدة عامة ، ثلاثية $(\vartheta = 3,\ J = L + 1,\ L - 1)$ ما عدا الحالة $L = 0$ ، انظر

(24.55) ، التى تكون السويات فيها أحادية*، بغض النظر عن هذا الاستثناء . ولنرمز لكل من سويات الهليوم اللامتناظر بالدليل $\nu = 3$ ، ويجب أن نلاحظ ظاهرة زيمان الشاذة عندما تطبق حقل مغناطيسى ضعيف على هذا النوع من الهليوم . ولنحسب الآن أخفض سوية ممكنة لذرة الهيليـوم عندما $n_1 = 1$ و $n_2 = 1, 2$ ، ويمكن كتابة الحدود فى حالة الهليوم المتناظر بالشكل التالى :

$$(1s,\ 1s)\,{}^1S_0$$
$$(1s,\ 2s)\,{}^1S_0$$
$$(1s,\ 2p)\,{}^1P_1$$

وتدل الرموز بين القوسين على حالات الالكترونات التى تؤلف ذرة الهليوم كل على حده ، كما ويرمز بحرف كبير إلى العزم المدارى ويرمز الدليل فى الأعلى إلى نوع التعدد ($\nu = 1$ هليوم متناظر ، $\nu = 3$ هليوم لامتناظر) وأخيرا يرمز الدليل فى الأسفل إلى قيمة العزم الكلى ، وبنفس الطريقة نحسب أخفض سويات الهليوم اللامتناظر فنجد الحدود التالية :

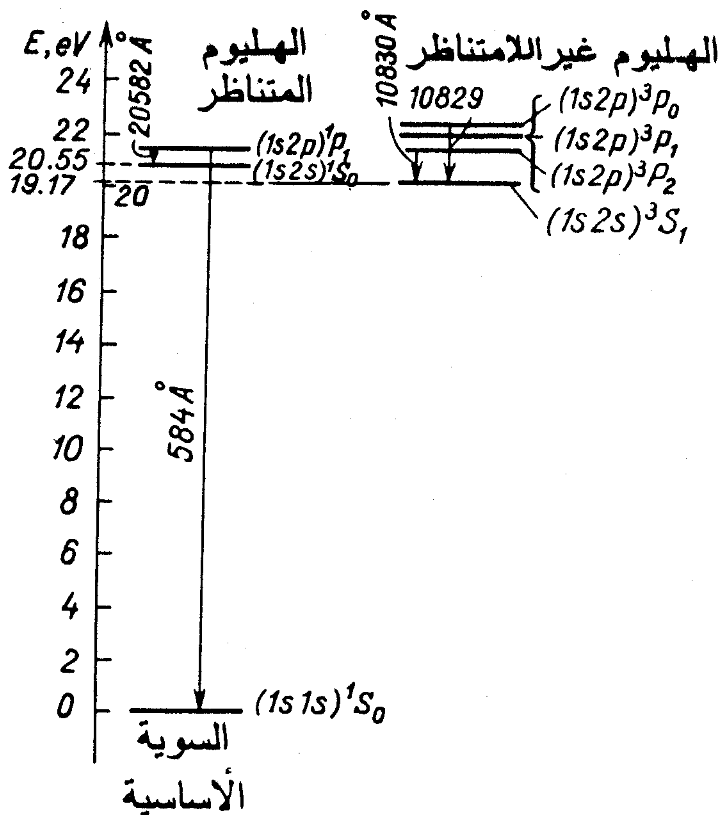
$$(\ 1s,\ 2s\ )\ {}^3S_1$$
$$(\ 1s,\ 2p\ )\ {}^3P_2$$
$$(\ 1s,\ 2p\ )\ {}^3P_1$$
$$(\ 1s,\ 2p\ )\ {}^3P_0$$

ومن الواضح أن الحالة $n_1 = n_2 = 1$ فى الهليوم اللامتناظر محظورة

---

* ويحدث نفس الشيء بالنسبة لذرة الهيدروجين ، فالحالتان $l = 1$ (الحد - p) و $l = 2$ (الحد - d) هما ثنائيان ، إلى آخره أما الحالة $l = 0$ (الحد - s) فتبقى أحادية .

بسبب مبدأ باولى ولهذا تكون أخفض سوية بالنسبة للهليوم اللامتناظر هى السوية $(1s, 2s)^3 S_1$ التى تبدو شبه مستقرة ، لأن الانتقال منها إلى السوية الأخفض $(1s, 1s)$ للهليوم المتناظر محظور بسبب قواعد الانتقاء ، ويبين



الشكل ٢٤ ـ ٢ . مخطط سويات الطاقة فى ذرة الهليوم . الانشطار للسويات . ^3P معطى بمقياس الرسم ، طول الموجة مقدر بالانجستروم ($\mathring{A}$) ، حيث $1\mathring{A} = 10^{-8}$ cm .

الشكل ٢٤ ـ ٢ المخطط العام للسويات الطاقوية لذرة الهليوم بنوعيها المتناظر واللامتناظر ، وسنرى بالنسبة لعناصر المجموعة الثالثة ($S = 1/2$ أو $3/2$) ثنائيات ورباعيات . . . وهكذا نرى أن العدد الكوانتى الكلى لالكترونات التكافؤ يحدّد تماما بالميزات العامة لانشطار الخطوط الطيفية .

البند ٢٥ ـ بنية الذرات المعقدة

أ) **معلومات عامة** . تتألف الذرة ، طبقا للمفاهيم المعاصرة ، من نواة تدور حولها الكترونات فيما يتعين العدد الذرى بعدد البروتونات Z ، أما العدد الكلى للبروتونات والنترونات (أى النوكلونات) فيعين العدد الكتلى A (نموذج ايفاننكو ـ هايزينبرغ ١٩٣٢) . وبما أن عدد الالكترونات يجب أن يساوى عدد البروتونات فى الذرة المعتدلة (نذكر بأن شحنتى الالكترون والبروتون متساويتان بالقيمة المطلقة ولكنهما مختلفتان بالاشارة) فإن العدد الذرى Z يجب أن يحدد الخواص الأساسية للذرة ، أما الذرات التى لها نفس القيمة Z ولكنها تختلف بقيم A فتؤلف نظائر (فمثلا لنظير $^{235}_{92}U$ و $^{238}_{92}U$ نفس عدد البروتونات والالكترونات ($Z = 92$) ولكنهما يختلفان بعدد النترونات ($A - Z = 146; 143$) . وسنتحدث الآن باختصار عن كتلة الذرة ووحدة قياسها . يعبر فى الفيزياء الذرية عن كتل الجسيمات بوحدات طاقتها الخاصة التى تقدر بالميجا الكترون فولط (MeV) ، وبالحساب البسيط نجد أن : $1\ MeV = 1{,}8 \cdot 10^{-27} g$ وأن كتلة كل من الالكترون m_0 والبروتون M_p والنترون M_n تقاس بوحدات طاقوية تساوى على الترتيب :

$$m_0 = 0{,}51 \ \ MeV$$

$$M_p = 938{,}3 \ MeV$$

$$M_n = 939{,}5 \ MeV$$

وتبرهن المعطيات التجريبية أن كتلة الذرة أقل دوما من مجموع كتل الالكترونات والبروتونات والنترونات الحرة (يمكن اهمال كتلة الالكترونات فى التقريب الأول) ، ويعود سبب هذا النقصان إلى التفاعل النووى بين النوكلونات ، فالطاقة التى تجعل النوكلونات متماسكة فى النواة هى طاقة سالبة ولهذا يجب أن تعطى كتلة النواة بالعلاقة :

$$M = M_p Z + M_n (A - Z) - \frac{|E|}{c^2}.$$

حيث يتناسب نقصان الكتلة $\Delta M = \frac{|E|}{c^2}$ ، طبقا للمعطيات التجريبية مع العدد الكتلى A ، وهكذا تتراوح النسبة $\Delta M_0 = \frac{\Delta M}{A}$ (النقصان النوعى للكتلة) لغالبية العناصر بين 7 MeV و 8,5 MeV ، ويستثنى من ذلك أخف النوى (1,1 MeV لنواة ^2_1H و 2,8 MeV لنواة ^3_1H ، وتصل تقريبا إلى 7 MeV فى نواة ^4_2H) . ويصغر المقدار ΔM_0 ببطء عندما تكبر A أما النهاية العظمى لـ ΔM_0 فتقع تقريبا فى منتصف الجدول الدورى (جدول مندلييف) . ويتضح مما ذكر سابقا أنه يجب أن نختار كوحدة كتلة ، كتلة أى عنصر ثقيل مقسومة على A وفى هذه الحالة تكون كتل العناصر الباقية مضاعفات لهذه الكتل تقريبا* . وقد اختيرت قبل ١٩٦١ كوحدة كتلة ذرية ، كتلة ذرة الأكسجين مقسومة على 16 . ولكن بعد اكتشاف النظيرين النادرين للأوكسجين $^{17}_8O$ و $^{18}_8O$ ظهرت وحدة كتلة كيميائية A_{ch} ووحدة كتلة فيزيائية A_{ph} فالوحدة الكيميائية هى كتلة 1/16 من خليط طبيعى من نظائر الأكسجين** ، أما الوحدة الفيزيائية فهى 1/16 من كتلة النظير $^{16}_8O$. وقد أدى الانتقال من المقياس الكيميائى (الذى استعمل بالفعل بصورة رئيسية قبل ١٩٦١) إلى المقياس الفيزيائى إلى ازدياد ملحوظ فى الأوزان الذرية ($A_{ph} = A_{ch} \cdot 1{,}000275$) ، ولقد وجد أن كتلة نظير الفحم $^{12}_6C$ مقسومة على 12 أسهل استعمالا لأنها ترتبط بالكتلة الكيميائية بالعلاقة : $A_c = A_x \cdot 1{,}000043$ وهذا لا يؤثر عمليا على كثير من الحسابات الكيميائية ، وقد اعتمدت وحدة الكتلة الفحمية نهائيا عام ١٩٦١ .

ولن نخوض هنا تفاصيل بنية النواة ولكننا سندرس بتفصيل أكثر مشكلة

---

* إذا اخترنا كتلة الهيدروجين ^1_1H بمثابة وحدة كتلة العناصر الباقية لن تكون أبدا مضاعفات لهذه الكتلة لأن طاقة التماسك فى ذرة الهيدروجين تساوى الصفر .

** نلاحظ أن نسبة النظائر تخضع للتدقيق دائما وهذا يسبب بعض الصعوبة فى تعيين A_x .

توزع الالكترونات على السويات الطاقوية للذرة ، ومن الضرورى أن نأخذ بعين الاعتبار ، عند حساب طاقة السويات فى الذرة ، تجاذب الالكترونات الكولونى مع النواة والذى يؤدى إلى طاقة الذرات الشبيهة بالهيدروجين :

$$E = -\frac{Z^2 Rh}{n^2} \qquad (25.1)$$

كما نأخذ بعين الاعتبار أيضا التفاعل بين كل الالكترونات الذى يؤدى إلى نقصان القيمة المطلقة لهذه الطاقة . ويميز كل الكترون فى الذرة المعقدة ، كما هو الحال فى ذرة الهيدروجين ، بأربعة أعداد كوانتية ، وفى حالة رابطة رسيل ـ ساوندرس عندما تجمع العزوم المغزلية والمدراية كل على حده ، يجب أن تؤخذ الأعداد الكوانتية الأربعة المذكورة كما يلى :

ـــ العدد الكوانتى الرئيسى $n = 1, 2, 3, \ldots$

ـــ المـــدارى $l = 0, 1, 2, \ldots, (n-1)$

ـــ المغناطـــيسى $m = 0, \pm 1, \ldots \pm l$

ـــ المغزلى $m_s = \pm 1/2$ وهو يختص بمسقط المغزل على المحور z .

وفى حالة الرابطة ـ (jj) يجب أن نختار هذه الأعداد الكوانتية بالشكل التالى :

ـــ الرئيسى n

ـــ المدارى l

ـــ الداخلى $j = |l \pm 1/2|$

ـــ $m_j = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$ وهذا العدد يختص بمسقط العزم الحركى الكلى على المحور z .

ومن المعلوم أن رابطة رسيل ـ ساوندرس تتحقق فى العناصر الخفيفة

أما الرابطة jj فيتحقق فى العناصر الثقيلة ، ويبدو أن كلا من النوعين يعطى عددا متشابها من الحالات من أجل قيمة معينة لـ n و l ، فيما تقابل مجموعة السويات الطاقوية قيمة واحدة للعدد الكوانتى الرئيسى n وتؤلف طبقة ، ويرمز للطبقات المختلفة بالعدد n ، بالرموز (تصنيف روتينجن للطبقات) التالية :

$$K(n=1).\ L(n=2),\ M(n=3),\ N(n=4),\ 0(n=5),\ P(n=6), Q(n=7)$$

أما الكترونات الطبقة الواحدة التى تكون لها قيم مختلفة بالعدد الكوانتى المدارى $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$ ، فتؤلف الغمامات (الأغلفة) $s-, p-, d-,$ $f-$ إلى آخره . ويجب تطبيق مبدأ باولى عند ملء الطبقات والغمامات المختلفة ، وطبقا لهذا المبدأ لا يمكن أن توجد فى حالة كوانتية مميزة بأربعة أعداد كوانتية أكثر من الكترون واحد ، ولهذا يمكن أن توجد فى حالة ذات قيم ثابتة لـ n و l و m الكترونان فقط يختلفان فيما بينهما باتجاه المغزل ($m_s = \pm 1/2$) . فإذا لاحظنا أن العدد الكوانتى m الذى يتحول من $-l$ إلى $+l$ يأخذ $2l + 1$ قيمة ، فإننا نجد لحساب النهاية العظمى لعدد الالكترونات فى غمامة معينة العبارة التالية :

$$N_{nl} = N_l = 2\,(\,2l + 1\,) \qquad (\,25.2\,)$$

وينتج من ذلك أن أكبر عدد ممكن للالكترونات فى الغمامات $f(\,l = 3\,)$ $s(\,l = 0\,), p(\,l = 1\,), d(\,l = 2\,),$ يساوى على الترتيب :

$$N_s = 2, N_p = 6, N_d = 10, N_f = 14$$

ولا تصادف غمامات ذات قيم l أكبر من هذه ، فى الذرات غير المهيجة . ولنحسب أخيرا أكبر عدد للالكترونات فى طبقة معينة :

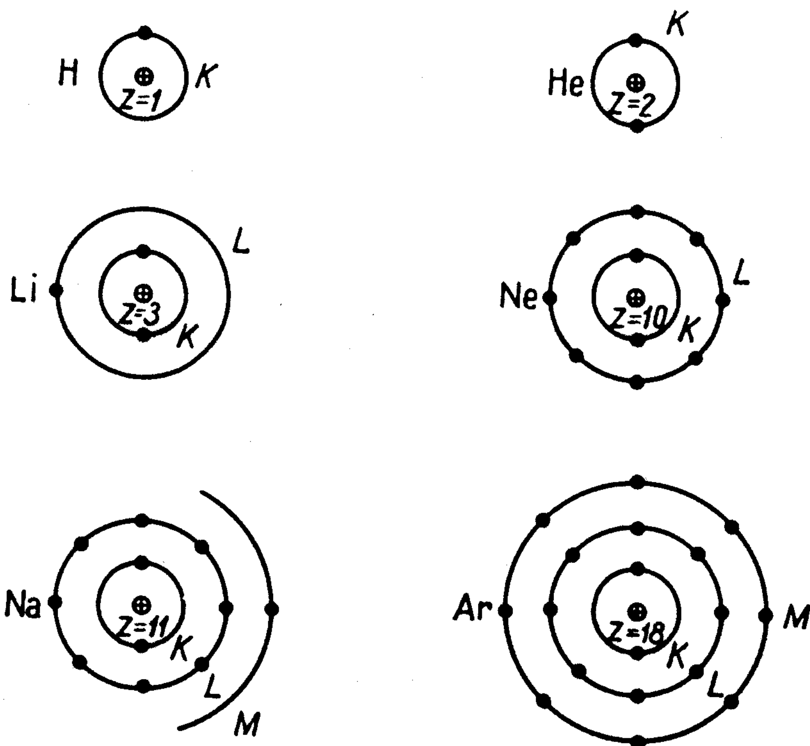
$$N_n = \sum_{l=0}^{n-1} N_l = 2(1 + 3 + \ldots + (2n-1)) =$$

$$= 2n \frac{1 + 2n - 1}{2} = 2n^2 \qquad (25.2a)$$

ومنه نجد أنه يمكن وجود الكترونين لا غير فى الطبقة K و 8 فى الطبقة L و 18 فى الطبقة M و 32 فى الطبقة N إلى آخره ، ولكى نضع النظام الذى بموجبه تمتلىء الطبقات وخاصة غمامات الذرات المعقدة من الضرورى أن نأخذ بعين الاعتبار التفاعل بين الالكترونات ، وقد أمكن بواسطة الميكانيكا الكوانتية تطوير طرائق تقريبية ساعدت فى وضع قاعدة يتم بموجبها ملء الغمامات الالكترونية والحصول على طاقة التماسك ، وأبسط هذه الطرائق هى الطريقة التى ذكرناها فى البند ٢٣ ألا وهى طريقة التغايرات (ريتس وهيلراس وآخرون) التى تطبق على الذرات الخفيفة (حتى البوتاسيوم) . أما طريقة الحقل ذاتى التناسق فتسمح بدراسة أكثر تفصيلا لبنية النواة وهو ما فعله هارترى وفوك ، وقد أمكن بواسطة هذه الطريقة معرفة توزع الالكترونات ليس فى الذرات الخفيفة وحدها وإنما فى الذرات الثقيلة أيضا ، حتى أن هذه الطريقة سمحت باكتشاف التركيب الغمامى للذرات متعددة الالكترونات ، غير أن استخدام هذه الطريقة ، وللأسف الشديد يتطلب عملا حسابيا كبيرا لا يمكن انجازه إلا بواسطة الآلات الحاسبة ، لأنها لا تعطى عبارات تحليلية للتوابع الموجية التى تميز توزع الالكترونات وإنما جداول عددية . كما ويمكن الحصول على نتائج أقل دقة بطريقة توماس - فيرمى الاحصائية التى طبقت على نطاق واسع ، بسبب بساطتها ، فى حساب الذرات المعقدة أو كثيرة الالكترونات .

ب) **طيف المعادن القلوية** . عند دراسة الخطوط الطيفية للذرات متعددة الالكترونات يجب التمييز بين الطبقات الداخلية والطبقات الخارجية ، فمثلا لا توجد فى ذرة الهيدروجين سوى الطبقة الخارجية التى تحوى على الكترون واحد (الطبقة K) وفى الهليوم ($Z = 2$) تمتلىء الطبقة K

تماما ، ولهذا يكون الهليوم غازا خاملا ، وفى الليثيوم ($Z = 3$) تمتلىء الطبقة الداخلية (الطبقة K) كما يوجد الكترون واحد فى الطبقة L الخارجية (معدن قلوى ، عنصر من الفصيلة الأولى) ، وفى النيون ($Z = 10$) تختم الطبقة L ، وفى الصوديوم تمتلئ الطبقات K و L تماما ولكن يبقى الكترون واحد على الطبقة الخارجية (معدن قلوى) إلى آخره . ويوضح الشكل ٢٥ ـ ١ امتلاء طبقات هذه الذرات . هذا ويجب ملاحظة أن



الشكل ٢٥ ـ ١ . مخطط امتلاء الغمامات الالكترونية فى مختلف الذرات . على اليسار الذرات التى فيها يبدأ امتلاء الغمامات الخارجية (الهيدروجين ، المعادن القلوية) ، وعلى اليمين الذرات ممتلئة الغمامات (الغازات الخاملة) ، أما النقاط السوداء فترمز إلى الالكترون ، والدوائر الصغيرة بإشارة + ترمز إلى النوى .

طاقة ارتباط الكترون موجود على الطبقات الداخلية أكبر بكثير من طاقة ارتباط الكترون آخر موجود على الطبقات الخارجية ، فمثلا يتطلب نزع الكترون التكافؤ الأول من ذرة الليثيوم صرف طاقة 5,39 eV ، بينما نحتاج لطاقة مقدارها 76 eV و 122 eV لنزع الالكترونين الثانى والثالث اللذين يقعان على الطبقات الداخلية . وبما أن لجميع ذرات الفصيلة الأولى (Li, Na, K, Rb, Cs) والتى تسمى المعادن القلوية ، الكترونا واحدا على الطبقة الخارجية ، كما هو الحال فى الهيدروجين فلا بد أن تتشابه فى صفاتها الضوئية والكيميائية مع ذرة الهيدروجين (نذكر على سبيل المثال ما هو معلوم عن جميع هذه العناصر أنها وحيدة التكافؤ ، ويظهر لها جميعا انقسام ثنائى للحدود الطيفية) . وينشأ الطيف الضوئى عند انتقال الكترون التكافؤ (أى الكترون الطبقة الخارجية) إلى حالته الأساسية من سوية طاقوية أعلى نتيجة لاثارة الذرة ، وتتطلب اثارة الكترونات الطبقات الداخلية ، كقاعدة عامة ، طاقة أكبر بكثير من الطاقة التى تتطلبها اثارة الكترونات الطبقات الداخلية كما أن انتقال الالكترونات الداخلية من حالات مثارة إلى حالاتها الأساسية فى المدارات الداخلية يترافق باشعاعات رونتجن (أشعة x) . وتشكل نواة الذرة مع الكترونات الطبقات الداخلية ما يسمى الهيكل الذرى الذى شحنته Z تساوى $A_a = Z-N$ ، حيث N عدد الكترونات الطبقات الداخلية . وفى المعادن القلوية (Li, Na ...) يكون $N = Z - 1$ وأما شحنة الهيكل الذرى لهذه المعادن فتساوى الواحد ($Z_a = 1$) ، ولهذا نرى أن القسم الرئيسى من الطاقة الكامنة الذى يمنع الالكترون من الهروب بعيدا عن النواة فى هذه المعادن سيكون كما فى ذرة الهيدروجين أى أن :

$$V_0 = -\frac{e_0^2}{r} Z_a = -\frac{e_0^2}{r}$$

وبذلك أمكننا اختيار الطاقة نفسها (التى حصلنا عليها عند دراسة ذرة

الهيدروجين) كأساس لدراسة طيوف المعادن القلوية ، انظر البند ١٢ ، وهى :

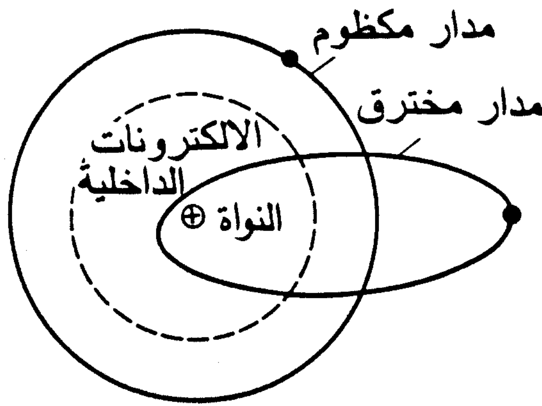
$$E_n^0 = -\frac{Rh}{n^2} \quad (25.3)$$

وعلى هذا المنوال أخذنا التقريب الأساسى (الصفرى) للتوابع الموجية هنا ، تماما كما فى ذرةالهيدروجين :

$$\psi^0 = \psi_{nlm} \quad (25.4)$$

إلا أنه أثناء دراسة التفاعل بين الالكترونات والذرة فى المعادن القلوية يجب أن تؤخذ بعين الاعتبار قوى الاستقطاب وتأثير انتشار الهيكل الذرى فى حجم ما بالاضافة إلى التفاعل الكولونى ، وهذا ما يعطى تصحيحا ما على الطاقة (25.3) ، مما ينزع الانطباق بالعدد الكوانتى l ، ذلك الانطباق الذى يحصل لذرة الهيدروجين .

وتقسم المدارات فى نظرية بور شبه الكلاسيكية بشكل صارم إلى مدارات « تخترق » الهيكل الذرى ومدارات « لا تخترق » هذا الهيكل ، وفى حالة المدارات « غير المخترقة » أو المكظومة (وهى قريبة من الدائرية) يجب اعتبار قوى الاستقطاب وحدها لأن الكمون خارج حدود الهيكل الذرى (أى وراء حدود المدارات الداخلية) لا يتوقف مطلقا على توزع الشحنة بالنسبة لنصف القطر إذا كان توزع هذه الشحنة متناظرا كرويا ، أما بالنسبة للمدارات التى « تخترق » الهيكل (قطوع ناقصة) فإن قانون توزع الشحنة سيكون ذا أهمية كبيرة (الشكل ٢٥ ـ ٢) . وبما أن مفهوم المسار فى النظرية الكوانتية يفقد معناه فإن التقسيم السابق إلى مدارات « مخترقة وغير مخترقة » هو مجرد اصطلاح يعنى ما يلى : هل يمكن ضمن الهيكل الذرى أن نضع تابعا موجيا يصف حركة الكترون التكافؤ ويساوى الصفر



الشكل ٢٥ ـ ٢ . المدارات ، المخترقة ، و ، غير المخترقة ، فى ذرات المعادن القلوية .

(للمدارات غير المخترقة) أم لا ؟ وبهذا الصدد يجب ملاحظة أن المدار s للالكترون فى الذرة هو دائما ، مخترق ، لأن تابعه الموجى لا يساوى الصفر لا داخل الهيكل الذرى ولا فى القسم المركزى للذرة ، أى فى مجال النواة

$$|\psi(0)|^2 = \frac{1}{\pi n^3 a_0^3} \qquad (25.5)$$

ولنحسب قبل كل شىء قوى الاستقطاب التى تظهر بين الالكترونات الخارجية والهيكل الذرى ، إذ يجب على الالكترون الخارجى أن يتدافع مع الكترونات الطبقات الداخلية ويتجاذب مع النواة ، ونتيجة لذلك يستقطب الهيكل الذرى وتنشأ بينه وبين الالكترونات الخارجية قوى استقطاب اضافية :

$$F_{\text{pol}} = -(Z-1)e_0^2 \times \left[\frac{1}{r^2} - \frac{1}{(r+x)^2}\right] = -\frac{2e_0^2(Z-1)x}{r^3} \qquad (25.6)$$

وتمثل القيمة $e_0(Z-1)x = p$ استقطاب الهيكل الذرى ، ومن جهة ثانية إذا اعتبرنا الهيكل الذرى ثنائى الأقطاب ومرن فيمكن أن نجعل :

$$p = \beta \mathscr{E} \qquad (25.7)$$

حيث β هى استقطابية الذرة و

$$\mathscr{E} = \frac{e_0}{r^2} \qquad (25.8)$$

هى القيمة المطلقة للحقل الكهربائى الناشئ عن الكترون الطبقةالخارجية فى مركز الهيكل الذرى ، وبملاحظة العلاقات الأخيرة نحصل على الطاقة الكمونية للاستقطاب .

$$V_{pol} = \int_r^\infty F_{pol} \, dr = -\int_r^\infty \frac{2\beta e_0^2}{r^5} dr = -\frac{\beta e_0^2}{2r^4} \qquad (25.9)$$

وعندئذ نحصل على طاقة استقطاب اضافية ، يمكن اعتبارها فى مسألتنا هذه طاقة اضطرابية وهى :

$$\Delta E_{pol} = \int \psi^*_{nlm} V_{pol} \psi_{nlm} \, d^3x = -\frac{\beta e_0^2}{2} \left\langle \frac{1}{r^4} \right\rangle \qquad (25.10)$$

وبما أنه ، طبقا لـ (12.40a) ، يكون لدينا :

$$\left\langle \frac{1}{r^4} \right\rangle = \frac{3}{2a_0^4} \frac{1 - \frac{l(l+1)}{3n^2}}{n^3 (l - {}^1/_2)\, l\, (l + {}^1/_2)(l+1)(l + {}^3/_2)}$$

فإنه العلاقة (25.10) تتحول إلى الشكل التالى :

$$\Delta E_{pol} = -\frac{e_0^2}{2a_0} \frac{2\delta}{n^3} \qquad (25.11)$$

حيث

$$\delta = \delta_1 - \frac{\delta_2}{n^2}$$

$$\delta_1 = \frac{3\beta}{4a_0^3 (l - {}^1/_2)\, l\, (l + {}^1/_2)(l+1)(l + {}^3/_2)} \qquad (25.12)$$

$$\delta_2 = \frac{l(l+1)}{3} \delta_1$$

ومنه نجد الطاقة الكلية ، التى لا تتعلق هذه المرة بـ n وحدها وإنما بـ l أيضا (لم نأخذ بعين الاعتبار حتى الآن التصحيحات المغزلية) :

$$E_{nl} = -\frac{R\hbar}{n^2} + \Delta E_{pol}.$$

وبتعويض ΔE_{pol} بقيمتها من (25.11) وملاحظة أن :

$$\frac{R\hbar}{n^2} = \frac{e_0^2}{2a_0 n^2}$$

فإننا نجد :

$$E_{nl} = -\frac{e_0^2}{2a_0 n^2} - \frac{e_0^2}{2a_0}\frac{2\delta}{n^3} \approx -\frac{e_0^2}{2a_0 (n-\delta)^2} \qquad (25.13)$$

لأن :

$$\frac{1}{(n-\delta)^2} = \frac{1}{n^2}\left(1-\frac{\delta}{n}\right)^{-2} \approx \frac{1}{n^2} + \frac{2\delta}{n^3}$$

وبفرض عدد كوانتى رئيسى مثال $n_{eff} = n - \delta$ فإننا نجد أن :

$$E_{nl} = -\frac{e_0^2}{2a_0 n_{eff}^2}$$

نلاحظ أنه لا يمكن الاستفادة من (25.12) من أجل الحالة s ، لأن المعامل δ_l ينتهى إلى اللانهاية عندما $l = 0$ ، ويعود السبب فى ذلك إلى أنه لا يمكن اعتبار قوى الاستقطاب موجودة إلا فى الحالة التى يكون فيها الالكترون بعيدا بعدا كافيا عن الهيكل الذرى ويلاحظ أن التابع الموجى للمدار s لا ينعدم حتى عندما $r = 0$ ، انظر (25.5) ، لكن تأثير الالكترونات الداخلية على المدار s الذى يعتبر « مخترقا » يرتبط بصورة رئيسية ، بانتشار الغمامة الالكترونية للهيكل الذرى . وعلى العموم تتعين الطاقة الاضافية الناتجة عن انتشار الالكترونات فى حجم الهيكل الذرى بالعبارة التالية :

$$\Delta E_{vol} = \int |\psi(r)|^2 V_{vol} d^3x \qquad (25.14)$$

حيث V_{vol} هو الفرق بين الطاقتين الكامنتين الناتجتين عن الكترونات الهيكل الذرى (إذا اعتبرنا أن هذه الالكترونات موزعة بالفعل ضمن

حجم ما) والشحنة المكافئة المجمعة فى المركز . ولكى نقيم المقدار δ للمدار s ، نفرض أن $(Z - 1)$ من الكترونات المدارات الداخلية تملؤ بانتظام حجما نصف قطره R ، وعندئذ نجد أن :

$$V_{vol} = -\frac{(Z-1)\,e_0^2}{r}\left(1 - {}^3/_2\frac{r}{R} + {}^1/_2\frac{r^3}{R^3}\right) \qquad (25.15)$$

فإذا عوضنا عن التابع الموجى بقيمته فى النقطة صفر ، انظر (25.5) ، نجد لحساب الطاقة الاضافية الخاصة بالمدار s العبارة التقريبية التالية :

$$\Delta E_{vol} \approx -{}^2/_5\frac{Ze_0^2R^2}{a_0^3n^3} = -\frac{e_0^2}{2a_0}\frac{2\delta}{n^3} \qquad (25.16)$$

مع العلم أن المقدار δ الذى يعطى بالعلاقة :

$$\delta = {}^2/_5\frac{ZR^2}{a_0^2} \qquad (25.17)$$

لا يتباعد الآن ، وهنا يجب الانتباه إلى أنه ، طبقا لنموذج توماس - فيرمى ، فإن نصف قطر الذرة يساوى

$$R = \frac{\gamma a_0}{Z^{1/3}} \qquad (25.18)$$

حيث γ معامل يتعلق بقانون توزع الشحنة داخل الذرة وهو من رتبة الواحد ، وبالتالى نحصل من جديد على صيغة من النوع (25.13) ، لحساب الطاقة الكلية للالكترون فى حالة المدارات s « المخترقة » ، وهى التالية :

$$E_{n,\,l=0} = -\frac{R\hbar}{(n-\delta)^2} = -\frac{e_0^2}{2a_0n_{eff}^2} \qquad (25.19)$$

حيث $n_{eff} = n - \delta$ ، أما δ فتعرف بالعلاقة (25.17) ، ولكى نبحث اختلاف التصحيحات للمدارات « المخترقة » و « غير المخترقة » وندرس كمثال ذرة الليثوم Li حيث يكون المدار - l « غير مخترق » ، إذ تعطى العلاقة (25.12) النتيجة $\delta_p = 0{,}04$ لأخفض حالة ($n = 2$) وبنفس الوقت نرى أن

قيمة δ للمدار s « المخترق » المحسوبة بالصيغة (25.17) بحيث أن تكون أكبر بمرتبة . هذا ويجب ملاحظة أن التباعد المركزى للمسار يقترب من الواحد عندما تكبر n وتبقى l ثابتة ، أى أن المدارات الأهليلجية تصبح أكبر طولا ، انظر (12.63) ، أو

$$\varepsilon^2 = 1 - \frac{l^2 + l + 1}{n^2} \qquad (25.20)$$

ونتيجة لذلك يجب أن نضم بالتدريج كل المدارات وندخلها فى عداد المدارات « المخترقة » عندما تكبر l باستثناء المدارات ذات القيمة $l = 0$ وحدها .

ملاحظة : نلاحظ أن التصحيح δ للمدارات « المخترقة » أكبر بكثير من هذا التصحيح δ للمدارات « غير المخترقة » . ويوضح الجدول (25.1) قيم δ التى يتم الحصول عليها تجريبيا (حيث وضعت نجمة * للمدارات المخترقة) .

الجدول ٢٥ ـ ١
التصحيح δ على طيوف المعادن القلوية

Z	العنصر	δ_s	δ_p	δ_d	δ_f
1	H	0,000	0,000	0,000	0,000
3	Li	0,412*	0,041	0,002	0,000
11	Na	1,373*	0,883*	0,010	0,001
19	K	2,230*	1,776*	0,146*	0,007
37	Rb	3,195*	2,711*	1,233*	0,012
55	Cs	4,131*	3,649*	2,448*	0,022

ولندرس الآن السلاسل الطيفية الأساسية لذرات المعادن القلوية ، من المعلوم أن الحدود الذرية لذرة الهيدروجين بدون حساب التصحيحات المغزلية ، تعرف بالعلاقة :

$$(nl) = -\frac{E_{nl}}{\hbar} = \frac{R}{n^2} \qquad (25.21)$$

ومنه نجد أن :

$$(1s) = \frac{R}{1^2} = R$$

$$(2s) = (2p) = \frac{R}{2^2} = \frac{R}{4} \qquad (25.22)$$

$$(3s) = (3p) = (3d) = \frac{R}{3^2} = \frac{R}{9}$$

أى أن الحالات الكوانتية فى ذرة الهيدروجين منطبقة ليس بـ m وحده وإنما بـ l أيضا . ويبين الشكل ٢٥ ـ ٣ السويات الطاقوية لذرة الهيدروجين . ونرى عند دراسة ذرة الليثوم أن السويات الطاقوية للطبقة K ($n = 1$) مملوءة (الشكل ٢٥ ـ ١) ولهذا تكون الطبقة الخارجية هى الطبقة L ، ويظهر أكبر تأثير للطبقة K على المدار s ، ويبدو أن الانزياح المقابل يكون كبيرا لدرجة يصعب تجريبيا معرفة فيما إذا كان ينتمى إلى الحالة n أم إلى الحالة $n - 1$. ولكى يحتفظ تشكل الحدود بنفس الحدود الذرية للهيدروجين فقد نسبه علماء الطيوف فى البدء إلى الحالة* $n - 1$.

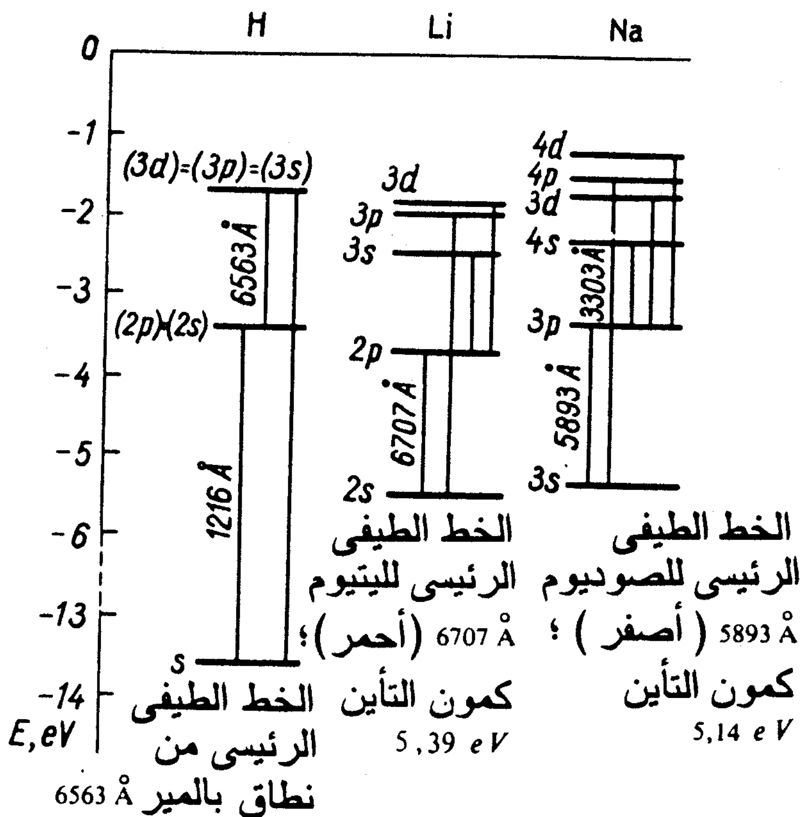
$$(ns) = (n^*s) = \frac{R}{(n - \delta_s)^2} = \frac{R}{(n^* + s)^2} \qquad (25.23)$$

حيث $n^* = n-1$ و $\delta_s = 0{,}412$ و $s = 1 - \delta_s = 0{,}588$ ولكى نميز هذا الحد (n^*s) عند الحد الأصلى (ns) فسنضع نجمة ، أما انزياح الحدود الأخرى لذرة الليثيوم ($l = 1{,}2$) فيمكن اهماله بالمقارنة مع الحدود المقابلة لذرة الهيدروجين ، ولذلك تحل مشكلة انتمائه إلى حالة ما أو إلى أخرى

---

* إذا أخذ العدد الكوانتى الرئيسى فى ذرة الليثيوم القيم $n = 2, 3, 4$ (الحالة $n = 1$ مشغولة بالكترونين وهى تؤلف طبقة داخلية) فإن العدد الكوانتى n^* يأخذ القيم

$$n^* = (n - 1) = 1, 2, 3, \ldots$$



الشكل ٢٥ ـ ٣ . مخطط سويات الطاقة فى الذرات وحيدة التكافؤ . يقدر الكمون عادة بـ eV ابتداء من السوية الأخفض وإلى أعلى . وقد أردنا هنا مقارنة سويات الطاقة فى مختلف الذرات ولذلك اعتبرنا كمون الفراغ الخارجى مساويا للصفر .

بشكل وحيد التعيين . وهكذا نرى أنه بينما تأخذ الحدود الذرية p, d لذرة الليثيوم (فى الرموز القديمة) مكانها تماما فى تلك الطبقات الموافقة للحسابات النظرية ($n^* = n$) ، فإن العدد الكوانتى الرئيسى للحد s ينقص بمقدار الواحد ($n^* = n - 1$) ، الشكل ٢٥ ـ ٣ . وتعتبر السلاسل الطيفية معلومة فى طيوف المعادن القلوية ، وقد رمز لها بحروف مختلفة ، فالرئيسية p (*principal*) والحادة s (*sharp*) والانتشارية d (*diffuse*) والأساسية f .

١ ـ السلسلة (النطاق) الرئيسية . الحد المتغير فيها هو الحد p ، ويمكن أن نكتب من أجلها ما يلى :

$$\omega = (1^*s) - (n^*p)$$

وهذا يعنى أنه :

من أجل H نجد : $(1s) - (n^*p)$ (سلسلة لايمان) ، $n^* = n$

(25.24) من أجل Li نجد : $(2s) - (np)$ ، $n^* = n$

من أجل Na نجد : $(3s) - (np)$ ، $n^* = n - 1$

٢ ـ السلسلة الثانوية الثانية (أو الحادة) (*sharp*) . المتغير فيها هو الحد s وعليه

$$\omega = (2^*p) - (n^*s)$$

وهذا يعنى أنه :

من أجل H : $(2p) - (ns)$ (سلسلة بالمير) ، $n^* = n$

(25.25) من أجل Li : $(2p) - (ns)$ ، $n^* = n - 1$

من أجل Na : $(3p) - (ns)$ ، $n^* = n - 2$

٣ ـ السلسلة الثانوية الأولى (أو الانتشارية) (*diffuse*) والمتغير فيها هو الحد d :

$$\omega = (2^*p) - (n^*d) \qquad (25.26)$$

٤ ـ السلسلة الأساسية f .

$$\omega = (3^*p) - (n^*f) \qquad (25.27)$$

والمتغير فيها هو الحد f .

وقد تم الحصول على هذه السلسلة طبقا لقواعد الانتقاء التى ينتج منها أن :

$$\Delta l = \pm 1$$

هذا وتعكس تسمية هذه السلاسل طبيعة بنيتها المضاعفة ، وكما هو الحال في ذرة الهيدروجين يعود سبب هذه البنية المضاعفة إلى التأثيرات المغزلية والنسبية . ولكي نحسب تباعد الحدود نستفيد من الصيغة التي تأخذ بعين الاعتبار التصحيحات النسبية والتصحيحات الناتجة عن التفاعلات المغزلية المدارية للذرات الشبيهة بالهيدروجين ، انظر (20.18) ، أي أن :

$$-\frac{\Delta E_{nlj}}{\hbar} = \frac{RZ^4\alpha^2}{n^4}\left(\frac{n}{j+1/2} - 3/4\right) \qquad (25.28)$$

حيث $\alpha = e_0^2 / \hbar c = 1/137$ ثابت البنية الدقيقة ، ويمكن حساب تأثير الكترونات الطبقات الداخلية في المعادن القلوية بأن نغير Z بقيمة فعالة ما $Z_{eff} < Z$:

$$-\frac{\Delta E_{nlj}}{\hbar} = \frac{R\alpha^2}{n^4} Z^4_{eff}\left(\frac{n}{j+1/2} - 3/4\right) \qquad (25.29)$$

ومن الواضح أنه يمكن أن نضع $Z_{eff} = 1$ للمدارات « غير المخترقة » لأن الكترونا كاف لحجب شحنة النواة الموجبة ، ومن الأفضل اختيار $(Z-1)$ Z_{eff} للمدارات « المخترقة » بالمقارنة مع التجربة ، وبما أن العدد الكوانتي j يأخذ القيم :

$$j = 1/2 , \qquad l = 0$$
$$j = l \pm 1/2 , \qquad l \neq 0$$

فيمكن الآن الاستنتاج أن جميع الحدود الطيفية للمعادن القلوية يجب أن تكون ثنائية عدا الحد الذي يجب أن لا ينقسم ، ولكي نجد مقدار التباعد (الفرق بين الحدين) نحسب قيمة الحدود الطيفية في حالتين ، الأولى : عندما يتوازى المغزل والعزم المداري ، أي أن

$$-\frac{\Delta E_{j=l+1/2}}{\hbar} = \frac{R\alpha^2 Z^4_{eff}}{n^4}\left(\frac{n}{l+1} - 3/4\right) \qquad (25.30)$$

والثانية : عندما يتعاكسان مباشرة ($l \neq 0$) ، أى أن

$$-\frac{\Delta E_{l=l-1/2}}{\hbar}=\frac{R\alpha^2 Z^4_{eff}}{n^4}\left(\frac{n}{l}-3/4\right) \qquad (25.31)$$

وهكذا نحصل لتباعد الحدين الذى يساوى الفرق بين العلاقتين (25.31) و (25.30) على العلاقة التالية :

$$\Delta\omega_n=\frac{R\alpha^2 Z^4_{eff}}{n^3 l\,(l+1)} \qquad (25.32)$$

ومنه نرى أن التباعد $\Delta\omega_n$ يتضاءل بتناسب عكسيا مع مكعب العـدد الكوانتى الرئيسى n . وبما أن الحد s الابتدائى لا ينقسم فى السلسلة الرئيسية والحد p هو الذى ينقسم ($l = 1$) فإن الخطوط الطيفية هى الثنائيات التالية :

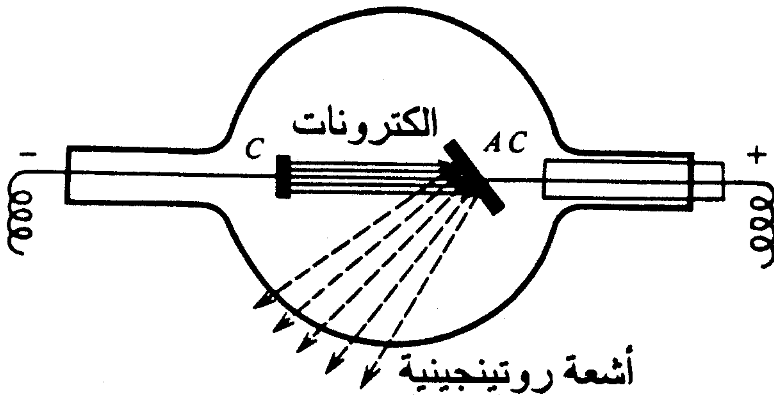
$$\Delta\omega_n=\frac{R\alpha^2 Z^4_{eff}}{2n^3}$$

وعلى العكس من ذلك نجد فى السلسلة الثانوية أن الحد p ينقسم بينما لا ينقسم الحد s ، ولهذا لا يتغير التباعد لكل الخطوط الطيفية لهذه السلسلة ، أى أن :

$$\Delta\omega_2=\frac{R\alpha^2 Z^4_{eff}}{16}$$

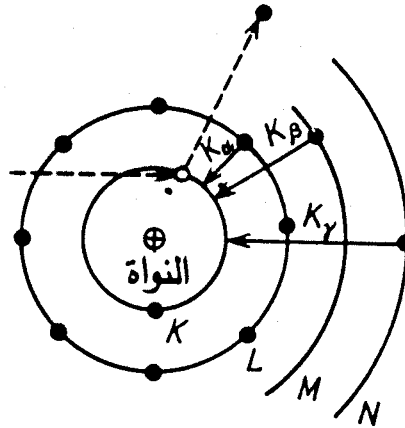
أما بالنسبة للسلاسل الباقية فتكون للتباعد طبيعة أكثر تعقيدًا بسبب انقسام الحدين البدائى والنهائى .

جـ) الطيوف الرونتجينية للذرات . لقد تم الحصول على معلومات تجريبية عن تركيب الطبقات الداخلية للذرات بواسطة دراسة الطيوف الرونتجينية ، ونذكر بأن هذه الأشعة تنشأ عن قذف المهبط المضاد فى أنبوبة الكترونية بتيار من الالكترونات السريعة ، الشكل ٢٥ ـ ٤ ، وقد أظهرت التحاليل التى أجريت على طيوف الأشعة الرونتجينية على وجود نوعين من



الشكل ٢٥ ـ ٤ . مخطط أنبوب رونتجين : K ـ الكاتود (المهبط) ، AK ـ الكاتود المضاد الموصل مع الأنود (المصعد) .

الطيوف : متصل ومتقطع ، وينشأ الطيف المتصل نتيجة لتوقف الالكترونات عند سقوطها على المهبط المضاد ، ولهذا يسمى أيضا طيف التوقف ، وينشأ الطيف المتقطع أو الطيف المميز عندما تزداد طاقة الالكترونات الساقطة على المهبط المضاد بحيث تتجاوز قيمة حرجة معينة ، ولا تتغير خواص الطيف المميز فى جميع المركبات الكيميائية للمادة . وهنا يظهر اختلاف هذا الطيف عن الطيف الضوئى لأن الأخير يتعلق ببنية المادة الذرية أو الجزيئية ، وتترتب الخطوط الطيفية للاشعاع المميز ، كالخطوط الضوئية للذرات ، طبقا لقانونية معّينة أو سلاسل يرمز لها بالحروف اللاتينية K, L, M, N . . . وتكون السلسلة ذات الأطوال الموجية الأدنى هى السلسلة K ثم السلسلة L . ولقد فسر كوسل عام ١٩٢٤ آلية ظهور الطيف المميز الرونتجينى التابع للمادة التى صنع منها المهبط المضاد فقال إن الالكترون إذ يقتلع عند سقوطه الكترونا من المهبط المضاد ولانتقاله من الطبقة K لاحدى الذرات ، فإنه يترك مكانا فارغا فى هذه الطبقة ، الشكل ٢٥ ـ ٥ ، يمكن أن يشغله الكترون آخر من الطبقات K, L, M ،



الشكل ٢٥ ـ ٥ . مخطط ظهور الطيف المميز (طبقا لكوسيل) ، ● ـ الكترونات ، أما الخط المتقطع فيبين عملية ترك الالكترون للغمامة ـ K .

وهذا بالضبط ما يسبب الخطوط الطيفية التى نرمز لها . . . $K_\alpha, K_\beta, K_\gamma$. ويظهر الطيف المميز عند انتقال الالكترونات من طبقة داخلية إلى أخرى . وبما أن طاقة ارتباط الالكترونات الموجودة على المدارات الداخلية أكبر بكثير من طاقة ارتباط الالكترونات الموجودة على المدارات الخارجية فلا بد للحصول على طيف الاشعاع المميز من استخدام الكترونات ذات طاقة أكبر بكثير (عشرات الكيلوفولتات) من الطاقة اللازمة (عشرات الفولتات) للحصول على الطيوف الضوئية ، وتوجد طريقتان تقريبيتان لبناء نظرية الذرة المعقدة دون اهمال تفاعل الالكترونات فيما بينها ، نعتبر فى الأولى أن الكمون الأساسى هو كمون النواة الذى يحجب تأثيره تماما الالكترونات الداخلية ، وقد استخدمت هذه الطريقة لبناء نظرية الطيوف الضوئية للمعادن القلوية ، وعندئذ يساوى الكمون الأساسى بشحنة النـواة Ze_0 وشحنـة الكترونات المدارات الداخلية $-(Z-1)\,e_0$ ، إلى الكمون الكلى فى هذه الحالة :

$$\Phi = \frac{e_0}{r}\left(Z-(Z-1)\right) = \frac{e_0}{r} \qquad (25.33)$$

ثم نختار كمونا اضافيا بمثابة كمون اضطرابى يأخذ بعين الاعتبار الاستقطاب وتوزع الغمامة الالكترونية ، وقد كانت هذه الطريقة مناسبة لوصف حركة الالكترونات الخارجية أى ذرات المعادن القلوية مثلا ، وعلى العكس من ذلك عند دراسة حركة الكترونات الطبقات الداخلية ، من المناسب أن نأخذ كمونا أساسيا بالشكل التالى :

$$\Phi = \frac{Ze_0}{r} \qquad (25.34)$$

أما الكمون الاضافى الذى تصنعه الطبقة الالكترونية فيضيف تصحيحا على الكمون Φ وهذا ما يؤدى إلى حجب (انخفاض فعال) شحنة النواة بمقدار $S_n e_0$ بحيث يمكن كتابة الكمون الكلى بالشكل التالى :

$$\Phi = \frac{(Z - S_n)\, e_0}{r} \qquad (25.35)$$

ومثال على ذلك ، ما برهناه عند دراسة الذرات الشبيهة بالهليوم ، انظر البند ٢٣ ، حيث رأينا أن أخذ تفاعل الكترونات الطبقة K بعين الاعتبار يؤدى إلى تقليص الشحنة الفعالة للنواة التى يمكن وضعها بصورة شكلية كما يلى $Z' = Z - \frac{5}{16}$ أى أن المقدار S_n يساوى فى هذه الحالة $5/16$. وقد لا يكون التصحيح على S_n تابعا لـ n وحده وإنما لـ l أيضا ، ويزداد هذا التصحيح بازدياد n لأنه يجب عندئذ أخذ أعداد أكبر من الالكترونات التى تحجب النواة بعين الاعتبار ، كما يزداد التصحيح السابق أيضا بازدياد l (لا يعتبر تأثير ذلك كبيرا) ، لأن المدارات ستصبح أقل « اختراقا » ، ولهذا يجب أن تتناقص الشحنة الفعالة وسطيا بعض الشىء . هذا ويمكن كتقريب أول ، اهمال هذا التصحيح (أى اعتبار أن التصحيح لا يتعلق بـ l) . ويؤدى استخدام الكمون (25.35) إلى ايجاد الصيغة نفسها لحساب الحدود الطيفية ، وهى التى حصلنا عليها لذرة الهيدروجين ، ولكن بتبديل المقدار Z بـ $(Z - S_n)$ ، أى أن

$$E_n = -\frac{(Z - S_n)^2 R\hbar}{n^2} \qquad (25.36)$$

ومن العلاقة الأخيرة نجد لحساب تواتر اشعاع الخط K_α العبارة التالية :

$$\omega_{K_\alpha} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = R\left[\frac{(Z - S_1)^2}{1^2} - \frac{(Z - S_2)^2}{2^2}\right] \qquad (25.37)$$

ومن هنا نرى أن تواتر طيف الأشعة الرونتجينية يزداد باضطراد مع تزايد العدد الذرى Z ، وكان أول من اكتشف هذا القانون عند تحليل المعطيات التجريبية ، هوالعالم موزلى الذى كتب القانون السابق بشكل يختلف قليلا عن (25.37) وذلك كما يلى :

$$\omega_{K_\alpha} = R(Z - S)^2\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2}\right)$$

ويمكن الحصول على هذه العلاقة من (25.37) إذا فرضنا فى الأخيرة أن التصحيح على الحجب لا يتغير بالنسبة للطبقات K و L ، أى أن : $S_1 = S_2 = S$. ولكننا نعلم أن القضية ليست بهذه السهولة ولذلك يجب أثناء دراسة الطيوف الرونتجينية ، تماما كما هو الحال فى الطيوف الضوئية ، اعادة حساب تواترات الحدود التى يمكن كتابتها طبقا لـ (25.36) بالشكل التالى :

$$\sqrt{\frac{T_n}{R}} = \sqrt{-\frac{E_n}{R\hbar}} = \frac{Z - S_n}{n} \qquad (25.38)$$

وقد سميت التبعية الأخيرة بقانون موزلى ويتم التحقق منه بيانيا (الشكل ٢٥ ـ ٦) ، فإذا أعطينا للعدد الكوانتى n قيما مختلفة نجد أن :

ـــ بالنسبة للحد K ($n = 1$)

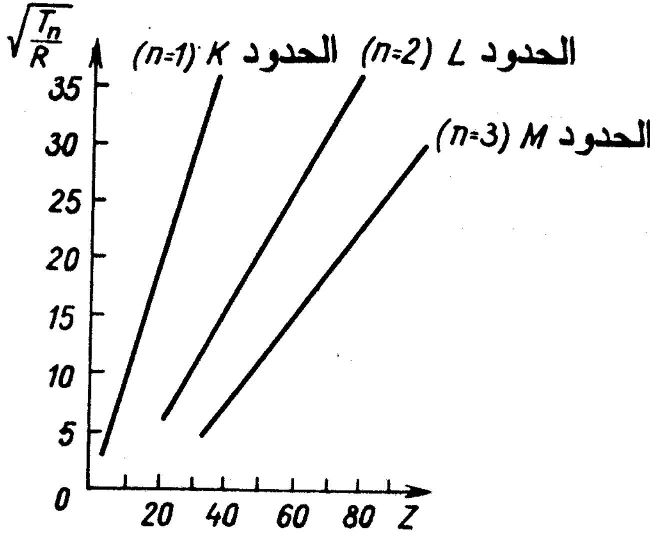
$$\sqrt{\frac{T_1}{R}} = \frac{Z - S_1}{1} \qquad (25.38a)$$

ـــ بالنسبة للحد L ($n = 2$)

$$\sqrt{\frac{T_2}{R}} = \frac{Z - S_2}{2} \qquad (25.38b)$$

ـــ بالنسبة للحد M ($n = 3$)

$$\sqrt{\frac{T_3}{R}} = \frac{Z - S_3}{3} \qquad (25.38c)$$



الشكل ٢٥ ـ ٦ . مخطط موزلى .

وقد أدى استقراء المنحنيات التجريبية $\sqrt{\frac{T_n}{R}} \approx f(Z)$ إلى حساب التصحيحات على الحجب التى تساوى وسطيا : $S_1 = 1,\ S_2 = 3{,}5,\ S_3 = 10{,}5$. وقد ثبت بالاضافة إلى ذلك ، تغير طيوف الاشعة الرونتجينية باضطراد مع تزايد Z . ولم يلاحظ أى قوانين دورية لهذا التغير وهذا بحد ذاته يمثل اختلافا آخر عن الطيوف الضوئية ، حيث لوحظ سلوكها الدورى فيما بينت الدراسة المفصلة وجود البنية التعددية لطيوف الاشعة الرونتجينية . ومن جهة يجب ملاحظة أن التصحيح على الحجب لا يتعلق بالعدد الكوانتى الرئيسى وحده وإنما بالعدد الكوانتى المدارى l أيضا ، ومن جهة ثانية يجب أن تعتمد العلاقة (20.18) أساسا للدراسة عند حساب التصحيحات النسبية التى تتبع أيضا العدد الكوانتى الداخلى j ، وعندئذ نجد عوضا عن (25.38) الصيغة التالية :

$$\sqrt{\frac{T_{nlJ}}{R}}=\frac{Z-S_{nl}}{n}+{}^1/_2\,\frac{(Z-S_{nl})^3\,\alpha^2}{n^3}\left(\frac{n}{j+{}^1/_2}-\frac{3}{4}\right) \qquad (25.39)$$

ومن (25.39) نجد أنه لا يوجد تباعد فى الحدود K لأنه لا توجد سوى حالة واحدة $(n = 1, l = 0, j = {}^1/_2)$ $1s_{1/2}$ بينما توجد ثلاث مركبات للحد L هى :

$$L_{I}\,(2s_{1/2}),\quad L_{II}\,(2p_{1/2}),\qquad L_{III}\,(2p_{3/2})$$

فإذا اعتبرنا تبعية التصحيح على الحجب إلى العدد l ، عندما $S_{2s} = 3$ و $S_{2s} = 4$ فإننا نحصل لحساب الحدود L على العلاقات التالية :

$$\begin{aligned} L_{I}:&\quad \sqrt{\frac{T_{2s1/2}}{R}}=\frac{Z-3}{2}+\frac{5\alpha^2}{64}(Z-3)^3\\ L_{II}:&\quad \sqrt{\frac{T_{2p1/2}}{R}}=\frac{Z-4}{2}+\frac{5\alpha^2}{64}(Z-4)^3 \qquad (25.39a)\\ L_{III}:&\quad \sqrt{\frac{T_{2p3/2}}{R}}=\frac{Z-4}{2}+\frac{\alpha^2}{64}(Z-4)^3 \end{aligned}$$

وتسمى الثنائيات المتوازنية L_{I}, L_{II} والمرتبطة بالحجب المختلف للنواة بالثنائيات الشاذة ، بينما تسمى الثنائيات المتباعدة L_{I}, L_{III} التى حصلنا عليها باعتبار وجود التأثيرات النسبية والمغزلية بالثنائيات النظامية . وبنفس الطريقة نرى أن الحدود M تحوى على خمس مركبات :

$$(3s_{1/2},\ 3p_{1/2},\ 3p_{3/2},\ 3d_{3/2},\ 3d_{5/2})$$

ولدراسة طيوف ا شعة رونتجين المميزة أهمية عملية بالاضافة إلى أهميتها النظرية الكبيرة لأن منحنيات موزلى برهنت أن الخواص الدورية للذرة ناشئة عن الكترونات التكافؤ وحدها وليس عن الالكترونات الداخلية ، كما ثبت نهائيا أن الرقم الدورى Z الذى فرضه مندلييف يتعين تماما بشحنة النواة ، ولقد أعطت دراسة بعض منحنيات موزلى الشاذة معلومات هامة عن امتلاء الغمامات الداخلية : مثل الغمامة $3d$ (العناصر ذات المغناطيسية

الحديدية) والغمامة 4d (اللانتانيدات) ، كما أمكن بشكل صحيح تفسير البنية التعددية والتصحيحات المغزلية النسبية بعد ادخال مفهوم المغزل ، وهكذا تنسجم بشكل جيد نظرية طيوف رونتجين مع النظرية الكوانتية للذرات المبنية على أساس نظرية ديراك ودراسة الجسيمات .

د) **اكتشاف قانون مندلييف الدورى** . لقد رتب مندلييف العناصر المعروفة فى زمنه طبقا لتزايد وزنها الذرى وبرهن أن الصفات الكيميائية لهذه العناصر تتكرر بعد عدد معين من العناصر ، فمثلا يكرر الصوديوم والبوتاسيوم . . . (المعادن القلوية) الصفات الكيميائية لليثيوم ، أما الكلور والبروم واليود . . . (زمرة الهالوجينات) فتكرر الصفات الكيميائية للفلور ولذلك أعطى مندلييف لكل عنصر رقما دوريا يحدد مكانه فى الجدول الدورى ، وبالرغم من أن تزايد Z ينسجم مع زيادة الكتلة الذرية للعنصر فقد يوجد بعض الشذوذ ، مثل :


$$({}^{40}_{18}Ar - {}^{39}_{19}K), \quad ({}^{128}_{52}Te - {}^{127}_{53}I)$$

حيث سبق فيها العنصر ذو الوزن الذرى الأعلى العنصر ذا الوزن الذرى الأخف . واضافة إلى ذلك فقد اكتشفت مجموعة نظائر فى الوقت الحاضر وهى عبارة عن ذرات لها نفس العدد Z ولكنها تختلف بالكتلة ، فمثلا $({}^{1}_{1}H, {}^{2}_{1}H, {}^{3}_{1}H)$. لقد أكد مندلييف نفسه أكثر من مرة أنه لا يوجد أى خطر على القانون الدورى باكتشاف عناصر جديدة إذ أن هذه الاكتشافات تعممه وتطوره ، ولقد اكتسب القانون الدورى أهميته الخاصة بهدى الاكتشافات الجديدة فى بنية الذرة والنواة لأن دراسة طيوف أشعة رونتجين وتجارب التشتت برهنت بشكل قاطع أن العدد Z يميز شحنة النواة كما يميز عدد الالكترونات فى الذرة المعتدلة ، عدا ذلك لقد كان معروفا 63 عنصرا لا غير فى زمن اكتشاف القانون الدورى وقد تنبأ مندلييف ، بوجود عشر

عناصر أخرى بالاضافة إلى أنه تنبأ بالخواص الفيزيائية والكيميائية لثلاثة منها : السكانديوم ($_{21}Sc$) والهاليوم ($_{31}Ga$) والجرمانيوم ($_{32}Ge$) ثم اكتشفت الغازات الخاملة فى نهاية القرن التاسع عشر ، ولم تعرف فى عصر مندلييف سوى ثلاثة عناصر من رمزة اللانتانيدات (العناصر الترابية النادرة) : السيريوم ، الديديوم (خليط من البراسيوديميوم والنيودميوم) والاربيوم ، أما فى عصرنا هذا فقد درست خواص أكثر من ١٤ عنصرا ترابيا نادرا ، وفى عام ١٩٣٧ عرف ٩٢ عنصرا وتبين أن أربعة منها مشعة وهى لا توجد عمليا فى الطبيعة ، وقد تم الحصول عليها فى الظروف المخبرية ، فقد حصل سيغرى عام ١٩٣٧ على العنصر المسمى بالتيكنيزيوم ذى الوزن الذرى $Z = 43$ وذلك بقذف عنصر الموليبدين بالديترونات وتبين أن نصف عمره يساوى $2 \cdot 10^5$ سنة ، وقد ورد أول نبأ عن اكتشاف نظير العنصر النادر الأخير ذى $Z = 61$ نتيجة لقذف النيوديميوم بالديترونات سنة ١٩٣٨ ولكن لم يتم الحصول عليه بشكل كاف (1,5g) إلا فى ١٩٤٧ حيث سمى البروميتيوم ، أما نصف عمر هذا النظير المستقر $^{147}_{61}Pm$ فيساوى 2,5عام . كما اكتشف سيغرى عام ١٩٤٠ عنصرا ($Z = 85$) سماه استاتيوم حيث تم الحصول عليه بتعريض البزموت لاشعاع الجسيمات α ، أما نصف عمر النظير $^{210}_{85}At$ الأكثر استقرارا فيساوى 8,3 ساعة ، واكتشف عام ١٩٣٩ العنصر قليل العمر المسمى بالفرانسيوم ($Z = 87$) من قبل العالم الفرنسى بيرى ، أما نصف عمر النظير $^{223}_{87}Fr$ الأكثر استقرارا فيساوى 22 دقيقة . وأخيرا يجب التأكيد على أنه بتطور الفيزياء النووية أمكن الحصول على عناصر ما بعد اليورانيوم اعتبارا من النبتونيوم ($Z = 93$) ، وفى عصرنا هذا استطاع العلماء تركيب 14 عنصرا من عناصر ما بعد اليورانيوم ، ولعل آخر هذه العناصر هو العنصر الكيميائي ذو الرقم الدورى $Z = 106$. ولقد ورد أخيرا نبأ من مدينة دوبنا السوفييتية باكتشاف نظير قصير العمر ينقسم ذاتيا ($Z = 107$) .

هـ) تعبئة (ملء) الطبقات . تتم تعبئة سويات الطبقات الالكترونية فى الميكانيكا الكوانتية حسب القواعد التالية :

١ - طبقا لمبدأ باولى ، لا يمكن أن يوجد أكثر من الكترون واحد فى كل حالة كوانتية ، ولهذا فإن أكبر عدد من الالكترونات ذات l معينة يساوى $2(2l + 1)$ الكترونا ، وهكذا يمكن أن يوجد كحد أعظمى فى الغمامات s, p, d, f عدد من الالكترونات يساوى 2, 6, 10, 14 الكترونا على الترتيب .

٢ - « ترغب » الالكترونات فى اشغال السويات الأكثر انخفاضا ولهذا يجب أن تعبأ أولا الطبقات $n = 1$ ثم الطبقة $n = 2$ ثم $n = 3$ . . . وتحدث مثل هذه التعبئة ، طبقا لما يسمى بالشكل المثالى عندما يتعين فى الذرة ذات العدد الذرى Z تأثير النواة مع $(Z - 1)$ الكترونا بالكمون (25.33) ، وذلك بفرض أن كل هذه الشحنات تقع فى المركز ، وعندئذ تكون طاقة الالكترون الباقى عبارة عن مجموعة سويات منطبقة ، كما فى ذرة الهيدروجين ، بالعدد l ، كما برهنا سابقا ، أما غمامات الطبقة الواحدة (أى ذات العدد الكوانتى الرئيسى المثبت n) فتتوضع حسب ازدياد l ، ولهذا تمتلىء أولا الغمامة s ثم p ثم d ، ولكن يبدو أن الغمامة $4s$ تتوضع تحت الغمامة $3d$ وكذلك بالضبط الغمامة $5s$ تحت $4d$ ، وتتوضع الغمامة $6s$ تحت $5d$ و $4f$ ، وبصورة مشابهة تكون $7s$ تحت $5f$. ويبدو أن الطبقة الخارجية (للذرات غير المهيجة) تتألف من الغمامتين s, p وحدهما ، هذا ويمكن للغمامتين d و f أن تمتلئا عندما تقعان فى الطبقتين الأولى والثانية على الترتيب ، وذلك إذا اعتبرت الطبقة الأولى الداخلية هى الطبقة المتوضعة مباشرة قرب الخارجية .

ملاحظة : تتم تعبئة الغمامات الالكترونية بالتتالى طبقا للقاعدة التالية : يتم تعبئة السويات كقاعدة عامة حسب تزايد مجموع العددين الكوانتيين الرئيسى والمدارى $n + l$ أما إذا تساوى مجموع هذين العددين لحالتين مختلفتين فتتم التعبئة كقاعدة عامة حسب تزايد n (قاعدة كليتشكوفسكى) . فإذا علمنا أن l تأخذ القيم $0, 1, 2, \ldots, n - 1$ فإننا نجد قاعدة لتعبئة الحدود الذرية فى كل طبقة فمثلا يجب أن تتم تعبئة الدور الرابع بالترتيب التالى : $4s\,(n + 1 = 4), 3d\,(n + l = 5), 4p\,(n + l = 5)$

والدور السادس :

$6s\,(n+l=6),\ 4f\,(n+l=7),\ 5d\,(n+l=7),\ 6p\,(n+l=7)$

ولنحاول برهان ذلك بواسطة أمثلة معينة ، تتم تعبئة الدورين الأول والثانى طبقا لقانون مندلييف تماما كما يجرى فى سويات ذرة الهيدروجين ، وتمتلئ الغمامة s فقط فى الطبقة $n = 1$ أما فى الطبقة $n = 2$ فتمتلئ الغمامة s أولا ثم الغمامة p ولو طبّق هذا المخطط على الذرات المعقدة لتوجب أن نتوقع امتلاء الغمامة $3d$ أولا ولكنه طبقا للجدول (25.1) يكـون $\delta_d = 0,146$ للكالسيوم $\delta_s = 2.23$ ولهذا تكون طاقتا الالكترونين الواقعين فى الحالتين $3d, 4s$ على الترتيب :

$$E_{3d} = -\frac{R\hbar}{(3-0,146)^2} = -\frac{R\hbar}{2,854^2}$$

$$E_{4s} = -\frac{R\hbar}{(4-2,23)^2} = -\frac{R\hbar}{1,77^2}$$

ومنه ينتج أن $E_{3d} > E_{4s}$ ولهذا يجب أن تمتلئ أولا السوية الأعمق $4s$ وبعدها السوية $3d$ ، وبالتالى يحوى الدور الأول كالدور الثانى تماما ثمانية عناصر ($_{11}Na - _{18}Ar$) ويتألف من الغمامتين $3s, 3p$ ، ويتوقع ، بعد أن تمتلئ الغمامة $4s$ فى الكالسيوم ، وجوب امتلاء الغمامة $4p$ ولكن دراسة الطيوف تثبت امتلاء الغمامة $3d$ فى العناصر التى تلى الكالسيوم ($_{21}Sc - _{28}Ni$) (ومن ضمنها العناصر ذات المغناطيسية الحديدية) ثم تستمر التعبئة النظامية ابتداء من $_{29}Cu$ وانتهاء بـ $_{30}Zn$ وهكذا يحوى الدور الرابع على 18 عنصرا ويتألف من الغمامات $4s, 3d, 4p$ ويتكرر فى الدور الخامس ($_{37}Rb - _{54}Xe$) أى أنه يحوى 18 عنصرا (تمتلىء الغمامات $5s, 4d, 5p$) ويحوى الدور السادس على 32 عنصرا ($_{55}Cs - _{86}Rn$) وذلك بسبب تعبئة الغمامة الأولى $5d$ (عشر الكترونات) والغمامة الداخلية الثانية $4f$

(14 عنصرا من زمرة اللانتانيات) هذا بالاضافة إلى الطبقة الخارجية ,6s 6p ويجب أن يكرر الدور السابع ما يحدث فى الدور السادس أى أنه يحوى على 32 عنصرا (الغمامات 6s, 5f, 6d, 7p) من هذا الدور ، أما ما يسمى بالاكتينات التى تملئ بالنسبة لها الغمامة الداخلية الثانية 5f ($_{90}$Th – $_{103}$Lr) فيجب أن تكرر اللانتانيات ، وهكذا يحوى الدور الأول عنصرين ويحوى كلا من الثانى والثالث 8 ، أما الرابع والخامس فيحوى كلا منهما 18 والسادس والسابع 32 (ولم يختم الدور السابع) . والشكل ٢٥ ـ ٧ يبين ترتيب امتلاء الطبقات فى الذرات .

و) **الدورية فى خواص العناصر** . لقد أعطت الميكانيكا الكوانتية تفسيرا طبيعيا للدورية التى أكتشفها مندلييف فى خواص العناصر ، ويرتبط هذا التفسير للدورية فى تعبئة الطبقة الخارجية التى يمكن أن تحوى 8 الكترونات (الحدود s, p) والتى لا تحدد الخواص الضوئية وحدها وإنما الخواص الكيميائية للذرات أيضا ، ولهذا تقسم كل العناصر إلى ثمان فصائل (انظر جدول مندلييف) تبعا لعدد الالكترونات على المدار الخارجى ، حيث يوجد الكترون واحد على الطبقة الخارجية لعناصر الزمرة الأولى (الهيدروجين والمعادن القلوية) وهذا يؤدى إلى البنية التعددية للحدود الضوئية (ما عدا الحد s) أما العناصر نفسها فهى ، كما سنبرهن فيما بعد ، وحيدة التكافؤ*. ويوجد الكترونا تكافؤ على الطبقة الخارجية فى عناصر الزمرة الثانية أى المعادن القلوية الترابية (البيريليوم ، المغنزيوم ، الكالسيوم . . .) ولهذا تكون الحدود الطيفية مفردة وثلاثية ، أما تكافؤها فيساوى 2 ، كما توجد ثلاثة الكترونات على الطبقة الخارجية فى عناصر

---

* سندرس مسألة التكافؤ بشكل أكثر تفصيلا فى البند ٢٧ المخصص لبنية الجزيئات وهنا سنقتصر على ملاحظة صغيرة لأن التكافؤ الأيونى الموجب والمغزلى الأصغرى يتعين بعدد الالكترونات فى الطبقة الخارجية ، أما التكافؤ الأيونى السالب فيتعين بعدد الالكترونات الناقصة .

113*-118*
7p
$_{104}$Ku, 105*-112*
6d
$_{90}$Th - $_{103}$Lr
5f
$_{89}$Ac
6d
$_{87}$Fr - $_{88}$Ra
7s
} (32) الدور السابع

$_{81}$Tl - $_{86}$Rn
6p
$_{72}$Hf - $_{80}$Hg
5d
$_{58}$Ce - $_{71}$Lu
4f(14)
$_{57}$La
5d
$_{55}$Cs - $_{56}$Ba
6s
} (32) الدور السادس

$_{49}$In - $_{54}$Xe
5p
$_{39}$Y - $_{48}$Cd
4d
$_{37}$Rb - $_{38}$Sr
5s
} (18) الدور الخامس

$_{31}$Ga - $_{36}$Kr
4p
$_{21}$Sc - $_{30}$Zn
3d(10)
$_{19}$K - $_{20}$Ca
4s
} (18) الدور الرابع

$_{13}$Al - $_{18}$Ar
3p
$_{11}$Na - $_{12}$Mg
3s
} (8) الدور الثالث

$_{5}$B - $_{10}$Ne
2p(6)
$_{3}$Li - $_{4}$Be
2s
} (8) الدور الثانى

$_{1}$H - $_{2}$He
1s(2) } (2) الدور الاول

الشكل ٢٥ ـ ٧ . مخطط امتلاء سويات الطاقة بالالكترونات فى ذرات جدول منديليف للتصنيف الدورى للعناصر . الغمامتان *s* و *p* قد تتوضعان فى الطبقة الخارجية ، أما الغمامات *d* فقد تتوضع ابتداء من الطبقة الداخلية الأولى ، أما الغمامات *f* فقد تتوضع ابتداء من الطبقة الداخلية الثانية (النجمة ترمز إلى أرقام بعض العناصر غير المكتشفة بعد) .

الزمرة الثانية ولهذا يجب أن تنقسم حدودها الضوئية إلى أربعة أقسام كحد اعظمى (رباعيات) وهى ثلاثية التكافؤ ، وعلى العكس من ذلك نجد أنه يلزم لعناصر المجموعة الرابعة (الفلور ، الكلور ، . . . إلخ) الكترون واحد لكى تمتلئ طبقاتها ، ولهذا نرى أنه بجانب التكافؤ الموجب الأعظمى الذى يساوى سبعة ، يمكن أن يتواجد ما يسمى بالمركبات الايونية وحيدة التكافؤ ، أى أن لها تكافؤا احاديا سالبا وأخيرا تكون الطبقة الأخيرة فى الغازات الخاملة (النيون ، الأرغون ، الكريبتون . . .) مملوءة تماما بينما الطبقة الجديدة التى تأتى بعدها مباشرة لم تبدأ بالامتلاء بعد ، ولهذا السبب تنتسب هذه العناصر إلى الزمرة الثانية . ولهذه القاعدة العامة (وجود ثمانية عناصر فى كل دور) بعض الشذوذ ، ويكون الشذوذ الأول بالنسبة للهيدروجين $Z = 1$ والهليوم $Z = 2$ ، اللذان يؤلفان الدور الأول إذ لا توجد فى هذا الدور ثمانية عناصر وإنما عنصران لاغير ، وهذا ناتج عن عدم وجود الغمامة p فى الطبقة K ، ولهذا تكون لهذين العنصرين خواص مزدوجة إلى حد ما ، وفى الحقيقة يجب على الهيدروجين أن يكرر الخواص الكيميائية والضوئية للمعادن القلوية لأن له نفس عدد الالكترونات فى الطبقة الخارجية كما رأينا ، ومن المعلوم أن لكل منهما انقساما أعظميا للحدود الطيفية يساوى اثنين وتكافؤ يساوى الواحد ، إلا أن الأمر يختلف إذا أخذنا عدد الالكترونات الناقصة فالهيدروجين يذكرنا بزمرة الهالوجينات (ينقص الكترون واحد لامتلاء الطبقة الخارجية) ولهذا يمكن أن يضم الكترونا واحدا إليه ليشكل شاردة سالبة تشبه الهالوجينات ويجب على الهليوم أن يذكرنا بخواص المعادن القلوية الترابية للفصيلة الثانية طالما أنه يملك نفس عدد الالكترونات على الطبقة الخارجية (اثنان) ويجب أن تكون لهذا العنصر كما للمعادن القلوية الترابية حدود طيفية احادية (المغزل يساوى الصفر) أو ثلاثية (المغزل يساوى الواحد) غير أن الهليوم يشبه تماما الغازات الخاملة فى خواصه الكيميائية لأن طبقته الخارجية مملوءة ، ولهذا يجب أن

لا يدخل من حيث المبدأ فى أى تفاعل كيميائى ويتضح من جدول مندلييف الدورى أنه ابتداء من السكانديوم ($Z = 21$) وانتهاء بالنيكل ($Z = 28$) (انظر جدول مندلييف فى أول الكتاب وآخره) تمتلئ الغمامة $3d$ الداخلية ، فإذا عرّفنا فى هذه احالة الفصيلة بعدد الالكترونات الواقعة على الغمامات $3d, 4s$ فإنه يجب أن نضم إلى هذه الفصيلة فصيلتين اثنتين هما التاسعة (IX) والعاشرة (X) غير أن لهذه الأخيرة صفات تقليدية خاصة بها ولا ينطبق عليها التكافؤ المعرف ، بصورة عامة ، بعدد المغازل غير المعادلة التى لا يمكن أن تكون أكثر من ثمانية . هذا وتتشابه العناصر التالية : الحديد ($Z = 26$) والكوبلت ($Z = 27$) والنيكل ($Z = 28$) فيما بينها ولهذا إذا اعتبرنا الخواص الفيزيائية والكيميائية كأساس لتشكيل زمرة ، فيمكن أن تضم جميعها فى فصيلة واحدة ولهذه العناصر خواص مغناطيسية حديدية مميزة ناتجة عن المغازل غير المعادلة للالكترونات فى الطبقة الداخلية ، وهذا يعود إلى أنه عند تشكيل الشبكة البلورية يبدو الحد $3d$ أكثر توافقا (من وجهة نظر طاقوية) من الحدود الباقية التى تتعادل مغازل الكتروناتها* . وتليها العناصر المغناطيسية الحديدية ، وابتداء من النحاس ($Z = 29$) وانتهاء بالكريبتون ($Z = 29$) تبدأ بالامتلاء الغمامة $4s$ ثم الغمامة $4p$ وعندئذ تختم الطبقة M ($n = 4$) ولهذا ينتسب الكريبتون فى خواصه الفيزيائية والكيميائية إلى الغازات الخاملة . ويكرر الدور الخامس الذى يبدأ من المعدن القلوى الروبيديوم ($Z = 37$) وينتهى بالغاز الخامل كزينون ($Z = 54$) الذى يكرر ، كما نوهنا سابقا الدور الرابع ، ولا يحوى أى خواص جديدة . ولقد ساعدت الميكانيكا الكوانتية أيضا بلكتشاف الخاصة المميزة لتعبئة الطبقات الالكترونية لعناصر فصيلة اللانتانيات ، وتتميز

---

* نلاحظ بهذه المناسبة أنه يمكن للعناصر التى لا تحوى مغازل متعادلة فى الطبقة الداخلية الثانية (الغمامة $4p$) أن تكون مغناطيسية حديدية ولقد اكتشف هذا العنصر فى فصيلة المعادن الترابية النادرة وهو الجادولينيوم ($Z = 64$) .

عناصر هذه الزمرة بامتلاء الغمامة الالكترونية $4f$ الأكثر عمقا (الطبقة الداخلية الثانية N) ابتداء من السيزيوم ($Z = 58$) وانتهاء باللوتسيوم ($Z = 71$) ، وبما أن الخواص الكيميائية تتحدد بصورة رئيسية بالكترونات الطبقة الخارجية فستكون جميع عناصر زمرة اللانتانيات أكثر قربا فى خواصها الكيميائية من العناصر التى تمتلئ غمامتها الداخلية الأولى d . ومن الضرورى بهذا الصدد ، ملاحظة .أن العلماء ظنوا لفترة طويلة أن الهافنيوم من فصيلة اللانتانيات لكن التحليل النظرى الذى أجراه بور أثبت أنه لا يمكن أن تتواجد فى هذه الفصيلة أكثر من 4 عناصر(العدد الممكن للحالات f) ، وقد أكدت التجارب الدقيقة أن الهافنيوم يكرر خواص السيركونيوم ، وأن زمرة الاكتينات الموجودة فى الدور السابع تشبه زمرة اللانتانيات حيث تتميز عناصر هذه الفصيلة التى تلى الاكتينيوم ، والتى تبدأ بالثوريوم ($Z = 90$) ، تتميز بامتلاء الحدود العميقة $5f$ من الطبقة 0 (14 عنصرا) بينما تكون الحدود $6s, 6p, 7s$ مملوءة تماما وتختتم زمرة الاكتينات باللورانسيوم ($Z = 103$) .

ز) **طريقة توماس ـ فيرمى الاحصائية** . بجانب الطرائق التقريبية التى تشكلت فى الميكانيكا الكوانتية طورت طريقة احصائية جديدة تنطبق بصورة خاصة على الذرات الثقيلة ، وهى الطريقة التى وضعها كلا من توماس وفيرمى . وفيها ندرس الالكترونات بشكل مشابه لما فى نظرية المعادن فنعتبرها غازا الكترونيا منطبقا ذا $T = 0$ ، وهذه الطريقة تكون أقل دقة من طريقة هارترى ـ فوك فى الحقل الذاتى التناسق لأنها لا يمكن أن تأخذ بعين الاعتبار كثيرا من التفاصيل الخاصة بسلوك الالكترونات الفردية ، وبغض النظر عن هذا النقص فإن لطريقة توماس ـ فيرمى أهمية كبيرة لأنها تؤدى إلى تفسير بعض الخواص العامة للذرات بأسلوب بسيط ، وبالرغم من أن هذه الطريقة لا تستطيع اظهار البنية الغمامية للذرة فقد أمكن بواسطتها

تفسير الخواص العامة لامتلاء الغمامات الالكترونية . ولننتقل بعد هذه الملاحظات إلى استخراج معادلة توماس ـ فيرمى . تحيط النواة المشحونة ايجابيا فى الذرات المشردة (المؤينة) غمامة الكترونات مشحونة سلبيا مما يحجب جزئيا الشحنة الموجبة للنواة ، وفى الذرات المشردة يتعين الكمون على مسافات تفوق ابعادها بالتقريب الأول بالعلاقة :

$$\Phi_{\infty} = \frac{(Z - N) e_0}{r} \qquad (25.40)$$

حيث Z العدد الذرى و N عدد الالكترونات ، وتكون $Z = N$ للذرات المعتدلة ولهذا نجد $\Phi_{\infty} = 0$ أى أن الالكترونات تحجب تماما تأثير النواة .

نأخذ بعين الاعتبار ثلاثة أنواع من طاقات التفاعل عند بناء النظرية الاحصائية وهى التالية :

١ ـ الطاقة الكهربائية الساكنة . أى طاقة تجاذب النواة مع الالكترونات وهى ترتبط بكثافة الالكترونات ρ_0 (عدد الالكترونات الموجودة فى وحدة الحجوم) وتتحدد بالعلاقة :

$$V_{n.-e} = - e_0 \int \rho_0 \Phi_{n} d^3 x \qquad (25.41)$$

حيث $e = -e_0$ هى شحنة الالكترون و $\Phi_n = \frac{Z e_0}{r}$ هو الكمون .

٢ ـ الطاقة الكهربائية الساكنة لتدافع الالكترونات فيما بينها :

$$V_{e.-e.} = - \frac{e_0}{2} \int \rho_0 \Phi_e d^3 x \qquad (25.41a)$$

حيث

$$\Phi_e (r) = - e_0 \int \frac{\rho_0 (r')}{| r - r' |} d^3 x'$$

٣ ـ الطاقة الحركية لالكترونات الذرة . وقد اتبعت نفس الطريقة أثناء بناء نظرية الجسم الصلب فى الدرجة صفر ، حيث يرتبط متوسط الطاقة

الحركية لالكترون منفرد طبقا للعلاقات* (5.78) و (5.79) مع كثافة الالكترونات ρ_0 بالعلاقات ($T_{av} = E_{av}$) ، أى أن :

$$T_{av} = \chi \rho_0^{5/3} \qquad (25.41b)$$

حيث

$$\chi = \frac{3}{10}\frac{\hbar^2}{m_0}(3\pi^2)^{2/3} = \frac{3}{10} e_0^2 a_0 (3\pi^2)^{2/3} \qquad (25.42)$$

ومنه نجد لحساب الطاقة الحركية للالكترونات العبارة التالية :

$$T = \chi \int \rho_0^{5/3} d^3x \qquad (25.43)$$

وهكذا تساوى الطاقة الكلية لالكترونات الغاز فى حقل الذرة ، مجموع القسمين (25.41) و (25.41a) والطاقة الحركية ، انظر (25.43) ، أىَ أن :

$$E = T + V_{n.-e.} + V_{e.-e.} =$$
$$= \chi \int \rho_0^{5/3} d^3x - e_0 \int \rho_0 \Phi_n d^3x + \frac{1}{2} e_0^2 \int \frac{\rho_0(r)\,\rho_0(r')\,d^3x\,d^3x'}{|r - r'|} \qquad (25.44)$$

وعندئذ يجب أن تحقق كثافة الالكترونات الشرط التالى :

$$\int \rho_0 d^3x = N \qquad (25.45)$$

وبالانطلاق من مبدأ التغايرات الذى يمكن صياغته ، مع تحقق الشرط (25.45) بالشكل التالى :

$$\delta \{E + e_0 \Phi_0 N\} = 0 \qquad (25.46)$$

فإنه يمكن ايجاد العلاقة بين الكمون الكلى $\Phi = \Phi_n + \Phi_e = \Phi$ وكثافة الالكترونات ρ_0، أى أن :

---

* لقد حصلنا على هاتين العلاقتين بعد أن فرضنا أنه لا يوجد أكثر من الكترونين فى حالة كوانتية مميزة بثلاثة اعداد كوانتية ، أى أن نظرية توماس - فيرمى الاحصائية تأخذ بعين الاعتبار مبدأ باولى بصورة آلية والذى يلعب دورا أساسيا فى نظرية الذرات متعددة الالكترونات .

$$\rho_0 = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\left(2m_0e_0(\Phi - \Phi_0)\right)^{3/2} \qquad (25.47)$$

حيث يجب أن نحسب مضروب لاغرانج Φ_0 (الذى يلعب دور كمون ما ثابت) ، من الشروط الحدية ، ولقد استفدنا عند استنتاج المعادلة الأخيرة من العلاقات التالية :

$$\delta\int \rho_0^{5/3} d^3x = \frac{5}{3}\int \rho_0^{2/3}\,\delta\rho_0 d^3x,$$

$$\delta\int \rho_0\Phi_0 d^3x = \int \Phi_0\,\delta\rho_0 d^3x, \quad \delta N = \int \delta\rho_0\, d^3x$$

$$\delta\frac{e_0^2}{2}\int \frac{\rho_0(r)\,\rho_0(r')}{|r - r'|}\, d^3x\, d^3x' =$$

$$= \frac{e_0^2}{2}\int \frac{[\delta\rho_0(r)\,\rho_0(r') + \rho_0(r)\,\delta\rho_0(r')]}{|r - r'|}\, d^3x\, d^3x' = -\,e_0\int \Phi_e\delta\,\rho_0\, d^3x$$

$$(25.48)$$

وبتبديل عبارة كثافة الالكترونات (25.47) التى حصلنا عليها فى معادلة بواصون (عندما يكون توزع الالكترونات متناظرا كرويا) فإننا نجد :

$$\nabla^2\Phi = \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\, r\Phi = 4\pi e_0\rho_0 \qquad (25.49)$$

فإذا لاحظنا بعد ذلك أن $\Phi_0 = \text{const}$ نحصل على معادلة توماس - فيرمى التى تعتبر أساس النموذج الاحصائى للذرة ، أى أن :

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\, r(\Phi - \Phi_0) = \frac{4e_0}{3\pi\hbar^3}(2m_0e_0)^{3/2}(\Phi - \Phi_0)^{3/2} \qquad (25.50)$$

ولكى ندرس مسائل محددة على أساس المعادلة (25.50) لا بد من حلها حسب شروط حدية معينة فإذا كانت الذرة مشردة فيمكن أن تكتب الشروط الحدية بالشكل التالى :

$$\Phi - \Phi_0 = \frac{Ze_0}{r}, \qquad r \to 0 \qquad (25.51)$$

$$\Phi = \frac{(Z - N)\,e_0}{r_0}, \qquad r = r_0 \qquad (25.52)$$

حيث يحسب المقدار r_0 بتطبيق شرط انعدام كثافة الالكترونات عند $r = r_0$ أى $\rho_0(r_0) = 0$ ومنه نجد لـ (25.47) أن :

$$\Phi_0 = \frac{(Z-N)e_0}{r_0} \tag{25.53}$$

وإذا أخذنا بعين الاعتبار معادلة بواصون (25.49) ، انظر أيضا (25.50) ، فإنه يمكن كتابة الشرط (25.45) بالشكل التالى :

$$\int_0^{r_0} r \frac{d^2 r(\Phi - \Phi_0)}{dr^2} dr = Ne_0. \tag{25.54}$$

وينتج من (25.53) ، عندما تكون الذرة معتدلة ($N = Z$) أن $\Phi_0 = 0$ ، $r_0 = \infty$ ولهذا نحصل عوضا عن (25.54) على العلاقة التالية :

$$\int_0^{\infty} r \frac{d^2 r\Phi}{dr^2} dr = Ze_0,$$

وعوضا عن (25.52) :

$$\lim_{r\to\infty} r\Phi = 0 \tag{25.55}$$

ونلاحظ أن لمعادلة توماس ـ فيرمى الحل الدقيق التالى :

$$\Phi - \Phi_0 = \frac{81\pi^2\hbar^6}{8m_0^3 e_0^5}\frac{1}{r^4} \tag{25.56}$$

وليس من الصعب التحقق من ذلك بتعويض (25.56) فى (25.50) ، والحل الذى حصلنا عليه للذرة المعتدلة يحقق أحد الشرطين الحديين وهو الشرط $r \to \infty$ (25.55) ولكنه لا يحقق الشرط الثانى عندما $r \to 0$ ، انظر (25.51) . ومع الأسف نقول أنه لا يمكن التعبير بشكل تحليلى بسيط عن حلول لمعادلة توماس ـ فيرمى تحقق كلا الشرطين السابقين .

ملاحظة : نلاحظ أن حل التكامل فى هذه الحالة بالطريقة العددية أسهل من حل معادلة هارترى ـ فوك لسببين : الأول هو أن معادلة توماس ـ فيرمى أبسط بكثير من معادلة هارترى ـ فوك والثانى أنه يمكن تحويل هذه المعادلة وشروطها الحدية (مثلا للذرة المعتدلة $Z = N, \Phi_0 = 0$) إلى الشكل العام غير المتعلق بـ Z ، ولهذا يجب فرض تابع جديد عوضا عن التابع $\Phi(r)$ طبقا للعلاقة :

$$\Phi(r) = \frac{Ze_0}{r} f(x)$$

حيث

$$x = \frac{r}{a}, \quad a = a_0 \left(\frac{9\pi^2}{128Z} \right)^{1/3}$$

وعندئذ تأخذ المعادلة (25.50) الشكل التالى :

$$\sqrt{x} \frac{d^2f}{dx^2} = f^{3/2} \qquad (25.50a)$$

وينتج من الشروط الحدية (25.51) و (25.55) أن :

$$f(x) = 1, \quad x \to 0; \quad f(x) = 0, \quad x \to \infty \qquad (25.51a)$$

والمعادلة الأخيرة عامة فهى لا تتعلق بـ Z (ولهذا يمكن تغيير المقياس المتعلق بـ Z) عند استكمال معادلة توماس - فيرمى بالطريقة العددية ثم تطبيق المعادلة لدراسة أى ذرة ثقيلة .

وإذا بدلنا (25.51) فى (25.47) نحصل لتغير الكثافة ρ_0 عندما $r \to 0$ على القانون التالى :

$$\rho_0 = \text{const}\, r^{-3/2} \qquad (25.57)$$

ان تعميم الحل (25.56) على الذرة المعتدلة يعطى قيمة كبيرة لـ Φ عندما $r \to \infty$ وقد برهنت طريقة هارترى - فوك الأكثر دقة أن كثافة الالكترونات يجب أن تتغير بقانون أسى عندما $r \to \infty$ ، وبما أننا نهتم بهذه المشكلة من الناحية الكيفية فقط فسنبين النظرية الاحصائية للذرة بشكل تقريبى بواسطة طريقة التغايرات وهذا ما يؤمن صياغة الحل بطريقة تحليلية ، ولكن هذا لا يخلو من بعض الأخطاء الكمية التى لن نهتم بها .

د) حل معادلة توماس - فيرمى بطريقة التغايرات . عند حل المسألة الخاصة بالتغايرات يمكن فرض عدد غير محدود من توابع الاختبار التى تتبع وسطاء متغيرة مختلفة λ ، ونختار تابع الاختبار انطلاقا من التصورات التالية : تتطلب منه أن يتطابق مع حل معادلة توماس - فيرمى عندما $r \to 0$ (ويعتبر هذا المجال هاما عند حل هذه المسألة بصورة كلية) وأن يكون

لهذا التابع شكل بسيط يؤمن اجراء تكامل دقيق عند حساب الطاقة ، ولنأخذ بمثابة تابع الاختبار الذى يحقق هذه الشروط ، التابع التالى :

$$\rho_0 = \frac{N\lambda^{3/2}}{16\pi r^{3/2}} e^{-\sqrt{\lambda r}} \qquad (25.58)$$

حيث يعبر هذا التابع على العدد العام للالكترونات بالشكل التالى :

$$\int \rho_0 d^3x = \frac{N\lambda^{3/2}}{4} \int_0^\infty \sqrt{r}\, e^{-\sqrt{\lambda r}}\, dr = N \qquad (25.58a)$$

ولهذا يتحقق الشرط (25.45) آليا ، ويبدو أن تابع الاختبار (25.58) يتغير بنفس الطريقة التى تتغير فيها الكثافة $(\rho_0 \sim r^{-3/2})$ ، أنظر (25.57) ، وهذا ما يفسر بوضوح كما سنرى فيما بعد التوافق المقدارى لنتائج المحسوبة من جهة أولية بواسطة تابع الاختبار ، ومن جهة ثانية بواسطة الكمون المحقق لمعادلة توماس ـ فيرمى. ان الكمون الذى تخلقه الكترونات الذرة يساوى :

$$\Phi_e = -\frac{Ne_0}{r}\left(1 - e^{-\sqrt{\lambda r}} - \sqrt{\lambda r}\, e^{-\sqrt{\lambda r}}\right) \qquad (25.59)$$

وليس من الصعب التأكد من ذلك إذا بدلنا على الترتيب عبارتى (25.58) و (25.59) وعبارة ρ_0, Φ_e فى المعادلة :

$$\nabla^2\Phi_e = 4\pi e_0\rho_0$$

ثم إذا اعتبرنا $\Phi_n = Ze_0/r$ فإننا نجد أن الكمون الكلى يحقق الشروط الحدية (25.52) من أجل $r = r_0 \to \infty$ وعندما تنعدم كثافة الشحنة وينعدم معها الحد الأسى $e^{-\sqrt{\lambda r_0}}$. ولنحسب بعد ذلك عبارة الطاقة الحركية من خلال الوسيط المتغير λ فنجد ، طبقا للعلاقات (25.43) و (25.58) ما يلى :

$$T = 4\pi\chi\left(\frac{N}{16\pi}\right)^{5/3}\lambda^{5/2}\int_0^\infty \frac{e^{-5/3\sqrt{\lambda r}}}{\sqrt{r}}\, dr = \frac{9}{400}\left(\frac{3\pi}{2}\right)^{2/3} N^{5/3}\lambda^2 e_0^2 a_0 \qquad (25.60)$$

أما عبارتا طاقة التفاعل الكامنة للنواة مع الالكترونات ، أنظر (25.41) ، وطاقة التفاعل بين الالكترونات فهما على الترتيب :

$$V_{n.-e} = -\frac{ZNe_0^2}{8}\lambda^{3/2}\int_0^\infty \frac{e^{-\sqrt{\lambda r}}}{\sqrt{r}}dr = -\frac{ZNe_0^2\lambda}{2} \qquad (25.61)$$

$$V_{e.-e} = \frac{N^2e_0^2}{8}\lambda^{3/2}\int_0^\infty \frac{dr}{\sqrt{r}}e^{-\sqrt{\lambda r}}\left(1-e^{-\sqrt{\lambda r}}-\sqrt{\lambda r}\,e^{-\sqrt{\lambda r}}\right) = \frac{N^2e_0^2\lambda}{16} \qquad (25.62)$$

وبجمع العلاقات (25.62) - (25.60) نحصل على الطاقة الكلية للغمامة الالكترونية (25.44) وهى التالية :

$$E = A\lambda^2 - B\lambda$$

حيث

$$A = \frac{9}{400}\left(\frac{3\pi}{2}\right)^{2/3}N^{5/3}e_0^2a_0, \quad B = \frac{1}{2}Ne_0^2\left(Z-\frac{N}{8}\right) \qquad (25.63)$$

ويمكن حساب الوسيط المتغير λ الذى يلعب دور مقلوب قيمة نصف القطر الفعال بتطبيق شرط النهاية للطاقة E ، أى $\frac{dE}{d\lambda} = 0$ ومنه نجد أن :

$$R_{eff} = \frac{1}{\lambda} = \frac{9}{100}\left(\frac{3\pi}{2}\right)^{2/3}\frac{N^{2/3}}{\left(Z-\frac{N}{8}\right)}a_0 \qquad (25.64)$$

$$E = \frac{1}{2}V = -\frac{B^2}{4A} = -\frac{25}{9}\left(\frac{2}{3\pi}\right)^{2/3}\frac{e_0^2}{a_0}N^{1/3}\left(Z-\frac{N}{8}\right)^2 \qquad (25.65)$$

كما ونجد بصورة خاصة إذا كانت الذرة معتدلة أن :

$$R_{eff} \approx 0,3\,\frac{a_0}{Z^{1/3}}$$

$$E = -\frac{25}{9}\frac{49}{64}\left(\frac{2}{3\pi}\right)^{2/3}\frac{e_0^2}{a_0}Z^{7/3} = -0,758\ldots\frac{e_0^2}{a_0}Z^{7/3} \qquad (25.66)$$

ومن الطريف ملاحظة أن الاستكمال العددى لمعادلة توماس - فيرمى يؤدى إلى نتيجة قريبة جدا وهى :

$$E^{T.-F.} = -0,769\ldots\frac{e_0^2}{a_0}Z^{7/3} = -20,94Z^{7/3}\,eV \qquad (25.66a)$$

وتعتبر هذه القيمة الأخيرة مقدارا مميزا لطاقة الارتباط الكلية (طاقة التشرد) للذرة المعتدلة ، أى أنها الطاقة اللازمة لابعاد الالكترونات من حول النواة ، هذا وبالرغم من أن القيم النظرية السابقة تعطى نتائج معقولة حتى بالنسبة لذرة الهيدروجين فهى تفوق القيم التجريبية ، زد على ذلك أن الأخطاء النسبية تصغر عندما تكبر Z ، انظر الجدول ٢٥ ـ ٢ .

الجدول ٢٥ ـ ٢

القيم النظرية والتجريبية لطاقة التشرد الكلية بوحدات e_0^2/a_0

العنصر	القيم النظرية	القيم التجريبية
H	0,769	0,5
Li	9,982	7,5
Na	206,9	162
Hg	21207	18130

ط) تطبيق طريقة توماس ـ فيرمى على نظرية الجدول الدورى للعناصر . لنحاول تعليل الترتيب الذى بموجبه تتم تعبئة الغمامات الالكترونية بطريقة توماس ـ فيرمى ، وبصورة خاصة سنحسب القيمة العنصرية لـ Z التى من أجلها تمتلىء الحالات *s,p,d,f* فى الذرات ، ويمكن حساب قيم Z هذه انطلاقا من اعتبارات فيرمى ١٩٢٨ . من المعلوم فى النظرية الكلاسيكية أن العزم الحركى L يرتبط بالاندفاع p بالعلاقة :

$$L = [rp]$$

ومنه نجد :

$$p_n^2 = \frac{L^2}{r^2}$$

حيث p_n مسقط الاندفاع على اتجاه متعامد مع نصف القطر r ، ومن الواضح أن مربع مسقط الاندفاع p_n^2 لا يمكن أن يتجاوز قيمة مربع العزم الأعظمى الذى سنرمز له $P = p_{max}$،وإذا علم كل من P و r تكون للمقدار L قيما تحقق العلاقة :

$$P^2 > \frac{L^2}{r^2} \qquad (25.67)$$

لقد رأينا فى البند ١٢ أثناء الدراسة شبه الكلاسيكية لمشكلة الذرة أن مربع العزم الحركى ، انظر (12.99) ، يساوى :

$$L^2 = \hbar^2 (l + 1/2)^2 \qquad (25.68)$$

وتعتبر العلاقة الأخيرة عمليا كحد وسط بين علاقة بور حيث يكون $L_B^2 = \hbar^2 (l+1)^2$ والعلاقة الكوانتية $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ الخاصة بحساب مربع العزم الحركى . ومن المعلوم أن الاندفاع الأعظمى $P = p_{max}$ يرتبط بكثافة الغاز الالكترونى ρ_0 بالعلاقة (5.77) ، أى أن :

$$P^2 = \hbar^2 (3\pi^2 \rho_0)^{2/3} \qquad (25.69)$$

ويمكن حساب كثافة الالكترونات من معادلة توماس ـ فيرمى التى تحل كما رأينا بطريقة عددية أو تقريبية ، وهناك تقريب جيد لحساب ρ_0 ينتج من حل معادلة توماس ـ فيرمى ، انظر (25.58) ، يعطى بالعبارة التالية :

$$\rho_0 = \frac{Z\lambda^{3/2}}{16\pi r^{3/2}} e^{-\sqrt{\lambda r}} \qquad (25.70)$$

مع العلم أننا حسبنا المضروب λ بطريقة التغايرات (طريقة ريتس) ، وإذا بدلنا قيم P^2 و L^2 السابقة من المتراجحة (25.67) نجد أن :

$$\left(\frac{3\pi Z}{16}\right)^{2/3} \frac{\lambda}{r} e^{-2/3\sqrt{\lambda r}} > \frac{(l+1/2)^2}{r^2} \qquad (25.71)$$

وبفرض متحول جديد $\lambda r = x$ نجد

$$e^{-2/3\sqrt{x}} > \frac{D}{x} \qquad (25.72)$$

حيث :

$$D = (l + 1/2)^2 \left(\frac{16}{3\pi Z}\right)^{2/3} \qquad (25.73)$$

ويبدو من المعادلة (25.72) أن الطرف الأيمن من (25.72) يصبح أكبر من الطرف الأيسر فى الحالتين عندما $(r \to 0)$ $(x \to 0)$ وعندما $x \to \infty$ ، ولهذا يمكن أن تكون للالكترونات فى الذرة قيمة معينة لـ l عندما يقع x فى المجال $x_1 < x < x_2$ بحيث تتحقق المتراجحة (25.72) حيث x_1 و x_2 هما جذرا المعادلة :

$$e^{-2/3\sqrt{x}} = \frac{D}{x} \qquad (25.74)$$

اما شرط وجود حالة ذات قيمة معينة لـ l فهو إن يتساوى الجذران السابقان :

$$x_1 = x_2$$

وعندئذ لا يمكن مساواة التابعين نفسهما فقط وإنما مشتقاتهما أيضا وهذا يعنى الحصول على علاقة ثانية بجانب العلاقة (25.74) وهى :

$$\frac{1}{3\sqrt{x}} e^{-2/3\sqrt{x}} = \frac{D}{x^2} \qquad (25.75)$$

وتحقق هاتان المساواتان عندما $\sqrt{x} = 3$ المعادلة التالية :

$$D = 9e^{-2}$$

وبتبديل قيمة D هنا من (25.73) نجد قيمة Z التى من أجلها تظهر الكترونات ذات قيمة معينة l للمرة الأولى :

$$Z = \frac{2e^{3}}{81\pi}(2l+1)^{3} = \gamma(2l+1)^{3} \qquad (25.76)$$

حيث ... $e = 2,718$ أساس اللوغاريتم الطبيعى ، أما المعامل γ فيساوى 0,158. وإذا استفدنا من معادلة توماس - فيرمى لإجراء نفس الحسابات نجد أن المعامل γ يساوى $\gamma_{t} = 0,155$ ، وهنا تتأكد مرة ثانية أن الكثافة (25.70) هى بالفعل تقريب جيد وهى نفسها التى استنتجت من معادلة توماس - فيرمى . ولنحسب بالصيغة قيم Z التى من أجلها تبدأ بالامتلاء الحالات s,p,d,f ، ولقد لخصت نتائج الحسابات فى الجدول ٢٥ - ٣ ، الذى يحوى بالسطر الأول قيما كسرية لـ Z حسبت بالصيغة (25.76) .

الجدول ٢٥ - ٣

الأعداد Z التى من أجلها تظهر الكترونات ذات l معينة .

l	s	p	d	f
	0	1	2	3
القيمة النظرية لـ Z طبقا لتوماس - فيرمى	0,15 1	4,2 5	19,4 20	53,2 54
القيمة التجريبية لـ Z	1 (H)	5 (B)	21 (Sc)	58 (Ce)

حيث اعتبرت $\gamma_{T.-F.} = 0,155$. وقد أعطيت في السطر الثانى أقرب قيم صحيحة لـ Z ولكن من الجهة الأعلى أما فى السطر الأخير فقد وضعت القيم التجريبية لـ Z التى من أجلها تظهر الالكترونات ذات l معينة ثم نكر اسم العنصر المقابل لذلك ، ويبدو من هذا الجدول ، التوافق الجيد لهذه النظرية التقريبية مع المعطيات التجريبية ، ويلاحظ بهذا الصدد أننا نحصل على توافق دقيق تماما مع التجربة إذا وضعنا أن γ تساوى 0,169 بدلا من 0,155 .

ومن المعلوم أن إمكانية تعبئة الحدود s فى العناصر الخفيفة وحدها ($Z = 1,2,3,4$) أما تعبئة الحد p فيبدأ من البورن ($Z = 5$) ، وهذا ما يتوافق كليا مع المعطيات التجريبية . ويبدو من الجدول ٢٥ ـ ٣ (بغض النظر عن « خشونة » النموذج الاحصائى) أن امتلاء الغمامة $3d$ لا يبدأ ، كما يمكن أن نتوقع ، من البوتاسيوم ($Z = 19$) ولكنه ينسحب حتى العنصر Sc ($Z = 21$) أى حتى تبنى الغمامة $4s$ ، وبنفس الشكل يفسر نموذج توماس ـ فيرمى « التوقف » الحاصل فى تعبئة الغمامة التى كان يمكن أن تمتلىء عند Ag ($Z = 47$) إلا أنه طبقا للنظرية ، يجب أن يتأجل ذلك ويبدأ عند السيزيوم ($Z = 58$) الذى ينتمى إلى زمرة اللا نتانيات ، وينتج أيضا من الصيغة (25.76) أن امتلاء الغمامة 5g ($l = 4$) للمرة الأولى سيكون ممكنا عندما $Z = 124$ ، وهكذا نرى أن نموذج توماس ـ فيرمى يعطى تفسيرا مقنعا جدا لترتيب امتلاء الغمامات فى الذرات المعقدة ، وبالإضافة إلى ذلك استطعنا بواسطة هذا النموذج ، حساب نصف قطر الذرات وطاقات ارتباطها . هذا ويساعد نموذج توماس ـ فيرمى على حساب تأثير حجب الطبقات الالكترونية على تناثر الالكترونات السريعة على الذرات ، كما يساعد على حساب تأثير هذه الطبقات على اشعاع الايقاف وعلى خلق الأزواج الالكترونية ـ البوزيترونية .

البند ٢٦ ـ الطيوف الجزيئية

أ) **التقريب الادياباتى** . الجزىء هو جملة تتألف من الكترونات وبعض النوى ، وبما أن لنواة الهيدروجين (البروتون) وهو أخف العناصر ، كتلة أكبر من كتلة الالكترون فيبدو من الممكن تقسيم حركة الجزىء ككل إلى حركتين : حركة النوى البطيئة وحركة الالكترونات السريعة ، إذ تتغير احداثيات النوى تغيرا بطيئا جدا عندما تتحرك الالكترونات بحيث يمكن اعتبار هذه النوى غير متحركة (التقريب الادياباتى) ، ولنكتب المعادلة الموجية لحركة الجسيمات فى الذرة بالشكل التالى :

$$(E - \mathrm{H})\,\psi(r_i, R_l) = 0 \qquad (26.1)$$

حيث r_i إحداثيات الالكترونات و R_l إحداثيات الذرات ويرتبط الهاملتونيان للجملة مع مؤثر الطاقة الحركية للالكترونات (ذات الكتلة m_0) T. الآتى :

$$\mathrm{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sum_i \nabla^2_{r_i} \qquad (26.2)$$

ومع مؤثر الطاقة الحركية للنوى T_R الآتى :

$$\mathrm{T}_R = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_l \frac{1}{M_l}\nabla^2_{R_l} \qquad (26.3)$$

ومع مؤثر الطاقة الكامنة لكل الجسيمات $V(r_i, R_l)$ ، بالعلاقة التالية :

$$\mathrm{H} = \mathrm{T}_r + \mathrm{T}_R + V(r_i, R_l) \qquad (26.4)$$

ولنبحث عن حل للمعادلة (26.1) بالشكل :

$$\psi(r_i, R_l) = \psi_r \psi_R \qquad (26.5)$$

حيث ψ_r تابع لاحداثيات الالكترونات بينما يتعلق التابع الثانى ψ_R بإحداثيات النوى R_j ونلاحظ أن ψ_r يتبع R وسيطيا أيضا ، إلا أنه يمكن اعتبار $R_j = \text{const}$ بالمقارنة مع الحركة السريعة للاكترونات (التقريب الادياباتى) ، ولنعوض (26.5) فى (26.1) ثم نفصل المتحولات فنجد أن :

$$\frac{1}{\psi_r}(E - T_r - V(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{R}_j))\,\psi_r = \frac{1}{\psi_R} T_R \psi_R = E_R - U(\boldsymbol{R}_j) \qquad (26.6)$$

حيث $E_R - U(R_j)$ هو مقدار الفصل الذى يجب أن يعتبر ثابتا* . وهكذا يؤمن التقريب الادياباتى فصل معادلة شرودينجر للجزيئات إلى معادلتين الأولى للنوى :

$$(E_R - U(\boldsymbol{R}_j) - T_R)\,\psi_R = 0 \qquad (26.7)$$

والثانية للالكترونات :

$$(E_r(\boldsymbol{R}_j) - T_r - V(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{R}_j))\,\psi_r = 0 \qquad (26.8)$$

حيث

$$E_r = E - E_R + U(\boldsymbol{R}_j)$$

مع تحقق شرط سكون النواة التالى :

$$\boldsymbol{R}_j = \text{const} \qquad (26.9)$$

وسنقتصر فيما يلى على دراسة الجزيئات ثنائية الذرة وعندئذ يجب اعتبار أن U هى طاقة ترابط الذرات فى الجزىء ، أما بالنسبة للجزيئات المعقدة فمن السهل حساب U بقانون نصف تجريبى بالرغم من أنه يمكن فى بعض الحالات (جزىء الهيدروجين مثلا) حساب U انطلاقا من تصورات نظرية عن طريق حل المعادلة (26.8) .

---

* يمكن أن يكون مقدار الفصل فى تقريبنا هذا تابعا لـ R_j ، غير أننا عزلنا من هذا التابع القسم E_R غير المتعلق بـ R_j وهو عبارة عن طاقة حركة النواة بينما يمثل المقدار $U(R_j)$ طاقة التفاعل الكامنة .

ب) طيف الجزيئات ثنائية الذرة . لندرس أولا حركة النواة فى الجزىء ثنائى الذرة بفرض أن كتلة إحدى النواتين M_1 وكتلة الثانية M_2 ، أما طاقة التفاعل بينهما فتساوى :

$$U(R_1 - R_2).$$

وإذا وضعنا مبدأ الاحداثيات فى مركز العطالة وفرضنا احداثيا نسبيا ، انظر البند ١٢ ، فإننا نجد :

$$r = R_1 - R_2 \qquad (26.10)$$

وعندئذ يمكن أن نكتب

$$\mathbf{P}_1 = -\mathbf{P}_2 = -i\hbar\nabla$$

حيث

$$\nabla_x = \frac{\partial}{\partial x}, \quad \nabla_y = \frac{\partial}{\partial y}, \quad \nabla_z = \frac{\partial}{\partial z} \qquad (26.11)$$

ولذلك تأخذ معادلة شرودينجر التى تصف حركة النوى ، انظر (26.7) ، الشكل التالى :

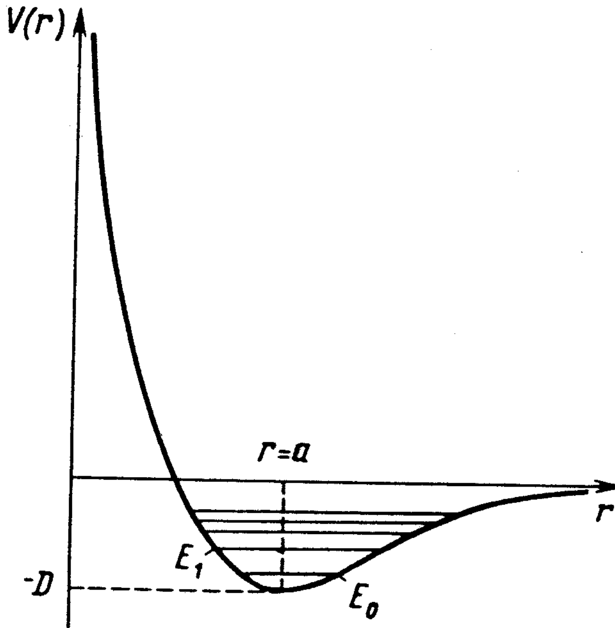
$$\nabla^2\psi_R + \frac{2M_{red}}{\hbar^2}(E_R - U(r))\,\psi_R = 0 \qquad (26.12)$$

حيث M_{red} الكتلة المختزلة التى تعطى بالعلاقة :

$$\frac{1}{M_{red}} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \qquad (26.13)$$

وبالرغم من أننا لا نعرف الطاقة $U(r)$ فمن الممكن الحصول على بعض خصائصها العامة التى تبدو ضرورية لكى يكون الجزىء مستقرا ، ولنفرض أولا أن للطاقة الكامنة تناظرا مركزيا أى أنها تتبع فقط القيمة المطلقة لـ r ثم إذا فرضنا أنه لا يمكن للذرات أن تكون قريبة جدا فيجب أن نفرض أن $U(r \to 0) \to \infty$ هذا بالاضافة إلى أنه يجب أن يهمل تفاعل الذرات على

مسافات بعيدة ولهذا يكون $U(r\rightarrow\infty)\rightarrow 0$ ، وباعتبار أن الجزىء يجب أن يكون جملة مستقرة عندما يكون البعد بين الذرتين مساويا قيمة معينة ($r = a$) فإن الطاقة الكامنة عند هذه النقطة ستصبح سالبة وتأخذ قيمة صغرى (إذا لم يتحقق ذلك فإن الجزىء يتحطم) . ويوضح الشكل ٢٦ - ١ الخواص العامة للطاقة الكامنة فإذا كان المقدار $x = r - a$ (يمثل انحراف



الشكل ٢٦ - ١ . منحنى الطاقة الكامنة للجزىء ثنائى الذرة .

الجزىء عن وضع توازنه المعين بالمقدار a) صغيرا ($x \ll a$) فإنه يمكن نشر الطاقة الكامنة $U(r)$ فى سلسلة بجوار النقطة $r = a$ ، أى أن :

$$U(r) = U(a + x) = U(a) + xU'(a) + \frac{x^2}{2}U''(a) + \ldots \qquad (26.14)$$

وبالاقتصار على الحدود الثلاثة الأولى فى النشر واعتبار أن للتابع U نهاية صغرى فى النقطة $r = a$ وبالتالى $U'(a) = 0$ و $U''(a) > 0$ نرى أن العبارة

(26.14) تكتب بالشكل* التالى :

$$U(r) = -D + \frac{M_{red}\omega^2 x^2}{2} \qquad (26.15)$$

ويمثل المقداران $U''(a) = M_{red}\,\omega^2$ و $U(a) = -D$ عامل مرونة الجزىء وطاقة تفككه** . ولكى نحسب سويات طاقة هذا الجزّىء (أى طيفه) نستخدم معادلة شرودينجر الخاصة بالقسم القطرى من ألتابع الموجى لأن للطاقة الكامنة (26.15) تناظرا مركزيا ، وبما أن ما يهمنا هو الحركة التسبية وحدها لذلك نستبدل فى (10.21) m_0 بـ M_{red} ، وعندئذ نحصل على المعادلة :

$$\nabla_r^2 R + \left[\frac{2M_{red}}{\hbar^2}(E - U(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = 0 \qquad (26.16)$$

وإذا لاحظنا أن :

$$\nabla_r^2 R = \frac{1}{r}\frac{d^2(rR)}{dr^2}$$

وبفرض التابع

$$rR = u \qquad (26.17)$$

نجد بعد تبديل (26.15) فى (26.16) المعادلة التالية :

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2M_{red}}{\hbar^2}\left\{E + D - M_{red}\frac{\omega^2 x^2}{2} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M_{red}r^2}\right\}u = 0 \qquad (26.18)$$

وبما أن $x \ll a$ فيمكن فى الحد الأخير اعتبار أن

$$\frac{1}{r^2} = \frac{1}{(a+x)^2} \approx \frac{1}{a^2}$$

---

* يختار الكمون $U(r)$ عادة بالشكل $U(r) = D\left(1 - e^{-\sqrt{\frac{M_{red}}{2D}}\omega x}\right)^2 - D$ وهو قانون تجريبى اقترحه مورس وباختيار مناسب للثابتين يمكن لهذا الكمون أن يمثل تقريبيا تبعية الكمون للمسافة بين الذرتين وسندرس فى البند القادم كيفية تشكل القوى بين الجزيئات من وجهة النظر الكوانتية .

** تعرف طاقة التفكك بأنها العمل الذى يجب صرفه (بالتقريب إلى طاقة الاهتزاز الصفرية) لكى تتمزق الذرة وتكون هذه الطاقة ، كقاعدة عامة ، من رتبة عدة الكترون فولطات .

وإذا فرضنا أن :

$$E + D - B\hbar l(l+1) = E' \qquad (26.19)$$

حيث $B = \frac{\hbar}{2J}$ و $J = M_{red} a^2$ فيمكن تحويل (26.18) إلى الشكل التالى :

$$u'' + \frac{2M_{red}}{\hbar^2}\left(E' - M_{red}\frac{\omega^2 x^2}{2}\right)u = 0 \qquad (26.20)$$

وتتطابق هذه المعادلة مع معادلة الهزاز التوافقى (7.14) ولهذا يكون

$$E' = \hbar\omega(\kappa + 1/2) \qquad (26.21)$$

حيث k هو العدد الكوانتى $k = 0,1,2,3,...$ وهكذا نحصل على طاقة الجزىء E ، بما فيها الطاقة الدورانية والاهتزازية ، وهى :

$$E = -D + B\hbar l(l+1) + \hbar\omega(\kappa + 1/2) \qquad (26.22)$$

وهنا يمثل الحد الأول طاقة التفكك بينما يتعلق الحدان الثانى والثالث بدوران الجزىء واهتزازه على الترتيب ونلاحظ بالمناسبة أن عدد السويات للطاقة المتقطعة للجزىء محدود لأن الجزىء يتحطم عندما تتحقق العلاقة :

$$B\hbar l(l+1) + \hbar\omega(\kappa + 1/2) \geqslant D$$

ومن الممكن تفسير تحطم الجزىء عندما تكبر الأعداد الكوانتية بما يلى : تصبح سعة الاهتزاز عندما $k >> 1$ كبيرة إلى درجة أن الذرات على هذه المسافة لا تتفاعل مع بعضها وبالتالى لن يبق الجزىء كجملة مترابطة وهذا ما يحدث أيضا (تحطم الجزىء) عندما تكبر الأعداد الكوانتية المدارية l التى تختص بطاقة الدوران .

ولننتقل الآن إلى دراسة الطيف الدورانى الاهتزازى ، وهنا سنعتبر أن وضع الخط الطيفى على سلم الطيف يتعين بصورة رئيسية بالطاقة الاهتزازية لأنها تفوق ،بالقيمة، الدورانية $(\lambda_{vib} \sim 10^{-3}cm,\ \lambda_{rot} \sim 10^{-2}cm)$ وعندئذ إذا لاحظنا أن الانتقالات التلقائية تحدث فقط من الأعلى إلى الأسفل

أى بتغير k إلى k-1 وأن العدد الكوانتى المدارى يتغير ، طبقا لقواعد الانتقاء ، أما إلى القيم الأصغر ($l \rightarrow l-1$) أو إلى القيم الأكبر ($l \rightarrow l+1$) ، فيمكن حساب تواتر الاشعاع بالعلاقة :

$$\omega' = \frac{E(\kappa, l) - E(\kappa - 1, l \pm 1)}{\hbar}$$

وطبقا لـ (26.22) نجد أن

$$\omega' = \omega + \omega_{ll'}. \qquad (26.23)$$

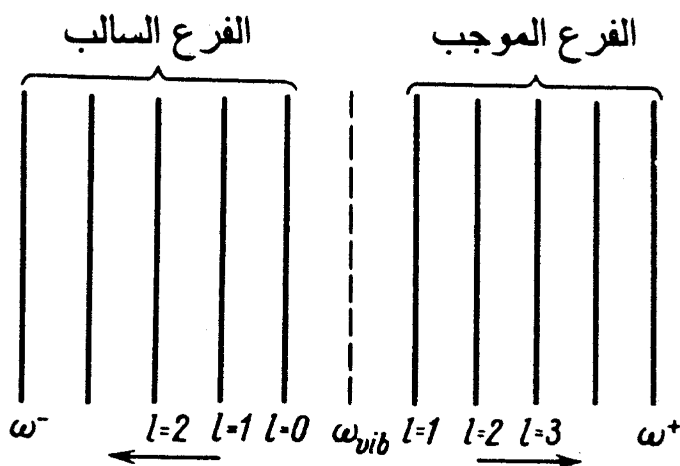
وهنا فرضنا أسوة بـ (11.29) و (11.30) أن $\omega_{l,\, l-1} = 2Bl$

وأن

$$\omega_{l,\, l+1} = -2B(l+1)$$

أما ω فتساوى

$$\omega = \frac{E_\kappa - E_{\kappa-1}}{\hbar}$$



الشكل ٢٦ ـ ٢ . الطيف الاهتزازى الدورانى للجزىء ثنائى الذرة .

وهكذا نحصل ، كما هو مبين على الشكل ٢٦ ـ ٢ ، على الفرعين التاليين :

$$\omega^{+} = \omega_{vib} + 2Bl \quad , \quad \omega^{-} = \omega_{vib} - 2B(l+1) \qquad (26.24)$$

وتشاهد مثل هذه الطيوف فى جزيئات HCl و CO .

وتعتبر دراسة طيوف الجزيئات الاهتزازية الدورانية ذات أهمية كبرى ، فيمكن مثلا من خلال هذه الدراسة حساب عزوم عطالة هذه الجزيئات وتركيبها النظيرى (وتختلف عزوم عطالة الجزيئات المؤلفة من نظائر مختلفة تبعا لاختلاف هذه النظائر) ، ولندرس أخيرا طيف جزىء عندما تقع إحدى ذراته فى وضع مهيج ، أى عندما ينتقل أحد الكترونات هذه الذرة من سوية طاقوية أعلى n إلى أدنى n' ولذلك يمكن كتابة طاقة هذا الجزىء بالشكل :

$$E_{M} = E_{n} + E_{K} + E_{l} \qquad (26.25)$$

حيث E_n طاقة الذرة المهيجة التى تحسب ، لذرة الهيدروجين مثلا ، (بصيغة بالمير)

$$E_{n} = -\frac{R\hbar}{n^{2}} \qquad (26.26)$$

أما الطاقتان الاهتزازية والدورانية فتعطيان على الترتيب بالعلاقتين

$$E_{K} = -D + \hbar\omega(K + 1/2) \qquad (26.27)$$

$$E_{l} = B\hbar l(l+1) \qquad (26.28)$$

وتتغير طاقة الجزىء نتيجة للانتقالات الاشعاعية فتصبح :

$$E_{M'} = E_{n'} + E_{K'} + E_{l'} \qquad (26.25a)$$

وبما أن القسم الأكبر من طاقة الاشعاع سينتج عن انتقال الالكترون من n إلى n' فى الذرة فيمكن لكل من العددين الكوانتيين k,l أن يزداد أو ينقص

$$\kappa' = \kappa \pm 1, \quad l' = l \pm 1 \qquad (26.29)$$

حصلة عامة لذلك سيحدث ضياع طاقة بالاشعاع على حساب انتقال الالكترون فى الذرة ، وهنا تبرز مسألة هامة وهى أن ارتباط الذرات فى الجزىء يتعلق ، بشكل أساسى ، بترتيب الغمامة التى يقع فيها الالكترون ، ولهذا من الطبيعى أن تتغير طاقة الارتباط نتيجة لانتقال الالكترونات وهذا ما يؤدى بدوره إلى تغير البعد بين الذرات ، ولندرس بالتحديد قبل كل شىء ما يحدث عندما ينتقل الالكترون من سوية مهيجة إلى السوية الأساسية حيث تزداد المسافة بين الذرتين وبالتالى تزداد $J = M_{red}a^2$ ويصغر المقدار $B = \frac{\hbar}{2J}$ ونتيجة لذلك تقل الطاقة الدورانية بعض الشىء وتصبح :

$$E_{l'} = B'\hbar l'(l'+1) \qquad (26.28a)$$

وسنجرى التحليل اللاحق من أجل $B' < B$ أما تواتر الاشعاع $\omega_M = \frac{E_M - E_{M'}}{\hbar}$ فيحسب بدون إهمال الانتقالات الدورانية والاهتزازية بالعلاقة :

$$\omega_M = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} \pm \omega + \omega_{l,l'} \qquad (26.30)$$

حيث

$$\omega_{l,l'} = Bl(l+1) - B'l'(l'+1) \qquad (26.31)$$

وإذا رمزنا للمقدار $\omega_0 = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} \pm \omega$ بـ ω_0 نجد أن (26.30) تصبح كما يلى :

$$\omega_M = \omega_0 + \omega_{l,l'}$$

ومن هنا نحصل على ثلاثة تواترات فرعية للطيوف المخططة (الشريطية) للجزيئات :

$$\omega^+ = \omega_0 + \omega_{l,l-1} \qquad (\text{الفرع } R) \qquad (26.32)$$

$$\omega^- = \omega_0 + \omega_{l,l+1} \qquad (\text{الفرع } P) \qquad (26.33)$$

$$\omega^0 = \omega_0 + \omega_{l,l} \qquad (\text{الفرع } Q) \qquad (26.34)$$

حيث يقابل الفرع الأول الموجب (الفرع R) من هذه العلاقات الانتقالات بين السويات الطاقوية الدورانية من الأعلى إلى الأسفل ، بينما يقابل الفرع السالب (الفرع P) الانتقالات من الأسفل إلى الأعلى ، أما الفرع الثالث (الفرع Q) المسمى الفرع الأصغرى فينشأ عندما لا تحدث الانتقالات بين السويات الدورانية وهو ناتج كليا عن تغير عزم العطالة الناجم عن الانتقالات داخل الذرة ، وبملاحظة (26.31) نستطيع كتابة الفروع السابقة بالشكل :

$$\omega^{+} = \omega_0 + (B - B')l^2 + (B + B')l \qquad (26.32a)$$

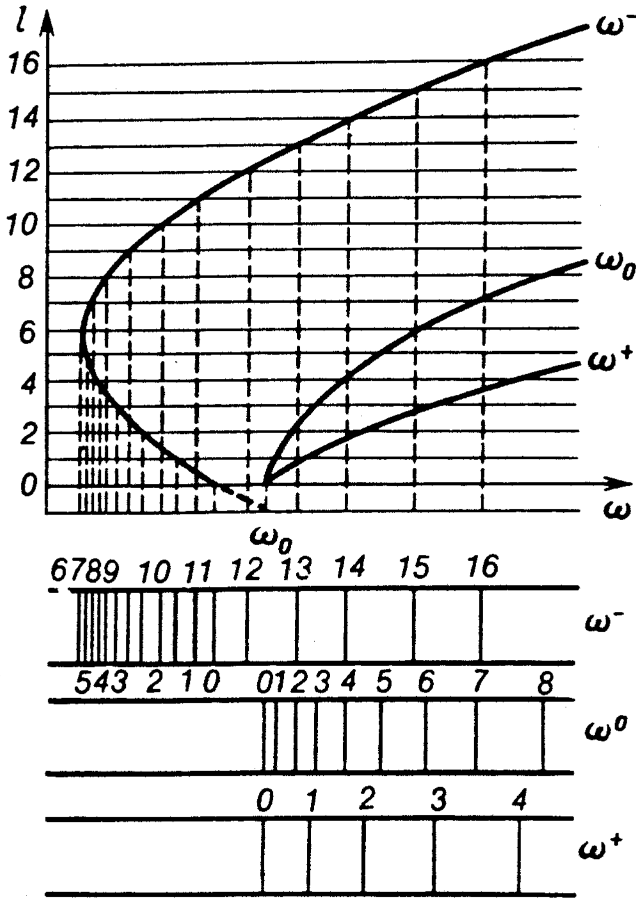
$$\omega^{-} = \omega_0 + (B - B')(l+1)^2 - (B + B')(l+1) \qquad (26.33a)$$

$$\omega^{0} = \omega_0 + (B - B')(l^2 + l) \qquad (26.34a)$$

ولقد تم تمثيلها بيانيا على الشكل ٢٦ ـ ٣ حيث وضعنا ω على محور الفواصل (السينات) و l على محور الترتيب (العينات) (مخطط فورتر) ، وهكذا نرى أنه نتيجة لتراكب الخطوط الدورانية $\omega_{l,l'}$ على الخط الاهتزازى الالكترونى نجد شريطا كاملا طرفه حاد من اليسار وطرفه انسيابى من اليمين وهذا ما يتوافق مع النتائج * التجريبية . وفى الختام نلاحظ وجود ثلاثة أنواع مختلفة من الطيوف : الطيف المستمر : الصادر عن الأجسام المسخنة (مثلا الاشعاع الصادر عن الجسم الأسود الذى يعطى توزعه الطيفى بصيغة بلانك) ، والطيف الخطى أو الذرى الناتج عن انتقالات الالكترونات فى الذرات من سوية إلى أخرى (كمثال على ذلك سلسلة بالميرفى ذرة الهيدروجين) ، وأخيرا (الطيف الشريطى الناتج عن اشعاع الجزيئات) الذى يكون مضيئا وذا نهاية حادة من جهة التواترات

---

* من السهل إجراء مناقشة مشابهة عندما $B < B'$ و $B = B'$



الشكل ٢٦ ـ ٣ : الطيوف الشريطية (المخططة) للجزيئات (مخطط فورتر) : ω^+ ـ الفرع الموجب R و ω^- الفرع السالب R و ω^0 الفرع الصفرى Q .

الأكبر . ولاتستطيع سوى أجهزة الطيوف ذات التبديد القوى إظهار أن هذا الطيف يتألف من جملة خطوط طيفية منفصلة ، وترتبط هذه الطيوف ، كما برهنا منذ قليل ، بالطبيعة الدورانية لحركة الجزيئات .

أ) **الأنواع الرئيسية للروابط الكيميائية** . تتعين الخواص الكيميائية للعناصر وطيوفها الضوئية أيضا ، بشكل رئيسى ، بالكترونات الطبقة الخارجية التى يمكن أن تتألف من الغمامتين s و p ، ولهذا يجب أن يستخدم التناسق الموجود فى أساس الدورية الضوئية (مثلا انقسام الحدود فى الأطياف الذرية . . .) كأساس لبناء نظرية الخواص الكيميائية للعناصر ، تلك الخواص التى تتكرر دوريا ، ونلاحظ بهذه المناسبة تكرار الخواص الأخيرة ليس للذرة المعزولة وحدها وإنما لعدة ذرات تؤلف جزيئا أيضا ، إذ لا تؤثر الكترونات الطبقات الداخلية تقريبا على العمليات الكيميائية لأنها ترتبط مع الذرة بشكل أقوى بكثير من الالكترونات الخارجية ، ولهذا تكون الطاقة المصروفة فى التفاعلات الكيميائية أصغر بكثير من طاقة ارتباط الكترونات الطبقات الداخلية . ولا بد من التفريق بين نوعين رئيسيين من الارتباطات الكيميائية : الرابطة الأيونية (مختلفة الأقطاب) والذرية (متجانسة الأقطاب) وسندرس بالتفصيل كلا من النوعين .

ب) **الجزيئات مختلفة الأقطاب** . من المعلوم أن الأملاح اللاعضوية تتركب من طبقتين أيونيتين موجبة وسالبة تتجاذبان بقوة كهربائية (كولونية) مما يجعل الذرات متماسكة ضمن الجزىء ، ويسمى مثل هذا الاتصال بالاتصال الأيونى فيما يسمى الجزىء فى هذه الحالة : بجزىء مختلف الأقطاب ، ومن المعلوم أن الأيونات تكون على نوعين : موجبة وسالبة . وتتبع إشارة الأيون (الشاردة) من جهة كمون التشرد ، أى الطاقة اللازمة لاقتلاع الالكترون الخارجى ، ومن جهة أخرى تتبع الفة الالكترون أى أنها تتوقف على الطاقة التى تستطيع بواسطتها الذرة المعتدلة أن تحتفظ بإلكترون إضافى على طبقتها الخارجية . ولنفترض أن ذرة معتدلة عددها

الذرى Z ولها N الكترونا على المدارات الداخلية و $Z_a = Z - N$ الكترونا على المدار الخارجى وعندئذ ستحجب تماما الكترونات الطبقة الداخلية تأثير القسم المقابل من النواة على الكترونات الطبقة الخارجية ولهذا تكون الطاقة الكامنة التى تحفظ الكترونات الطبقة الخارجية بالشكل التالى :

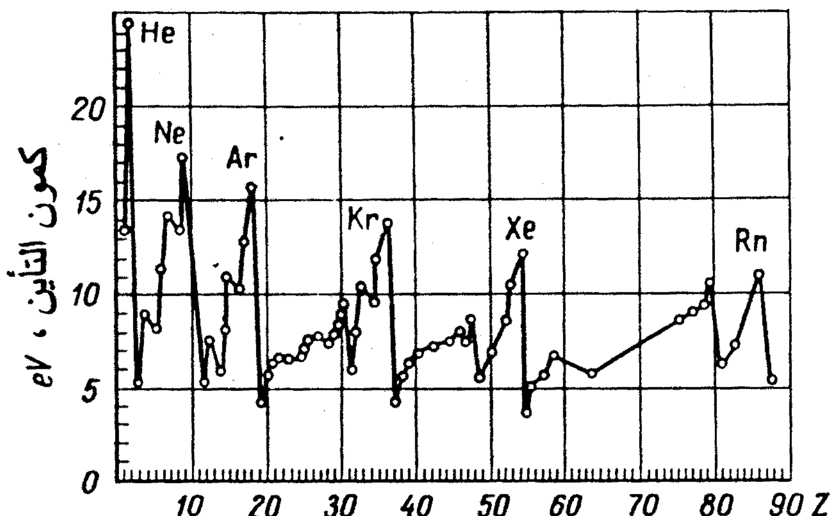
$$V = -\frac{Z_a e_0^2}{r}$$

وبنفس الطريقة أيضا يجب أن تحجب تماما الكترونات الطبقة الخارجية تأثير قسم النواة الباقى $Z_a e_0$ عن الغمامات الالكترونية الموجودة وراء الغمامة الخارجية (أى غمامات الحالات المهيجة) ولن يتعادل تماما القسم الباقى من شحنة النواة مع الطبقة الخارجية ، ولهذا تستطيع النواة أن تحتفظ بالكترونات إضافية فى المدار الخارجى مما يؤدى إلى تشكل شاردة سالبة* .

ويوضح الشكل ٢٧ ـ ١ تابعية طاقة التشردz التى تبلغ نهاية صغرى فى المعادن القلوية وعظمى فى الغازات الخاملة ، وهذا المنحنى يتكرر بصورة عامة مع تكرار الالكترونات نفسها على الطبقة الخارجية ، ويجب أولا ملاحظة أنه ليس من الملائم لذرات الغازات الخاملة،طاقويا،والتى تبلغ عندها طاقة التشرد قيمة كبرى أن تعطى الكترونا خارجيا لذرة أخرى ، كما أنها لا تستطيع الاحتفاظ بالكترون إضافى على الطبقة الخارجية التى تكون

---

* نذكر على سبيل المثال أن عشر الكترونات واقعة على المدارات الداخلية للصوديوم ($Z = 11$) تحجب تماما تأثير عشرة وحدات شحنة من النواة ، أما الالكترون الباقى فيحجب جزئيا شحنة النواة عن المدار الخارجى ، وفى ذرة الكلور ($Z = 17$) فإن عشر الكترونات داخلية تحجب تماما الطبقة الخارجية أما الالكترونات السبعة الباقية فتحجب جزئيا عن النواة ولهذا يكون من السهل على ذرة الكلور أن تحتفظ بالكترون وتتحول إلى شاردة (Cl^-) بينما يسهل على ذرة الصوديوم أن تترك الكترونا لتتحول إلى شاردة موجبة (Na^+) .



الشكل ٢٧ ـ ١ . تابعية طاقة التأين للرقم الذرى من أجل ذرة معتدلة .

مملوءة تماما ، ولهذا لا يمكن طبقا لمبدأ باولى أن يوجد الكترون تاسع ، وقد كان يعتقد دائما أن الغازات الخاملة لا يمكن أن تتواجد إلا فى الحالة الذرية ، غير أنه تم اكتشاف بعض مركباتها الكيميائية منذ فترة قصيرة ، ويسهل على الكترونات المعادن القلوية والقلوية الترابية أن تمنح الكترون تكافؤها إلىٰ ذرة أخرى (طاقة التشرد عندها صغرى) لتتحول بهذا إلى شاردة موجبة مثلا (Na^+) ، وعلى العكس من ذلك نرى أن لذرات الزمرة السابعة (الهالوجينات) وكذلك الزمرة السادسة (الاكسجين وغيره) طاقة تآلف عظمى مع الالكترون بالمقارنة مع العناصر الأخرى ، انظر الجدول ٢٧ ـ ١ ، وأن طاقة تآلف الالكترون فى الصوديوم وفى الذرات الخاملة تنعدم عمليا . ولقد حاول كوسل لأول مرة بناء نظرية الارتباط الأيونى عام ١٩١٦ انطلاقا من نظرية بور فى بنية الذرة ، فقد بنى كوسل نظريته على أساس انغلاق الطبقات ذات الثمانية الكترونات فى الغازات الخاملة التى ليس لها أى تكافؤ . ويعرف التكافؤ الموجب (أو التكافؤ بالنسبة للهيدروجين)

الجدول ٢٧ ـ ١

طاقة تآلف بعض العناصر مع الالكترون

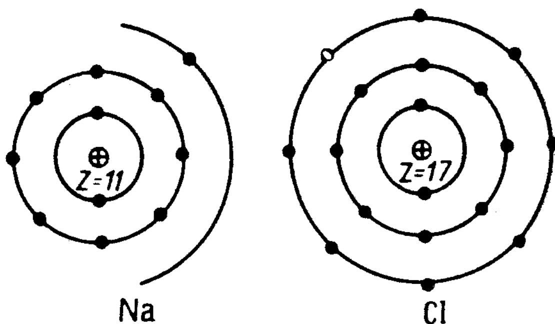
العنصر	طاقة التآلف مع الالكترون	العنصر	طاقة التآلف مع الالكترون
H	0,71	Cl	3,72
F	4,13	O	3,07

بعدد الالكترونات فى الطبقة الخارجية التى يسهل الاستغناء عنها (ذرات الزمرتين I و II) ، أما التكافؤ السالب (أى التكافؤ بالنسبة للفلور أو الثنائى بالنسبة للاكسجين) فيعرف بعدد الالكترونات التى يمكن أن تنضم للذرة ، أى عدد الأمكنة الفارغة (الناقصة عن 8) فى الطبقة الخارجية (انظر البند ٢٥) ، ويظهر التكافؤ السالب بوضوح تام عند عناصر الزمرتين IV و VII ، ويمكن من الناحية الكيفية أن يظهر النوعان السابقان معا عند كل عنصر ، ولسنا فى صدد تطوير نظرية الارتباطات الكيميائية مختلفة الأقطاب بشكل مطول ، وإنما سنقتصر على الخطوط العامة لدراسة تشكل واحد من الجزيئات النموذجية المعروفة هو جزىء NaCl ، حيث يضيع قسم من الطاقة عندما ينتقل الكترون التكافؤ فى الصوديوم إلى المدار الخارجي للكلور أى عند تشكل الشاردتين Na^+ و Cl^- (الشكلان ٢٧ ـ ٢ و ٢٧ ـ ٣) ، وفى الحقيقة تفقد ذرة الصوديوم الطاقة $-E_{Na} = 5,1\ eV$ * (طاقة التشرد) وبنفس الوقت تكون لذرة الكلور طاقة تآلف

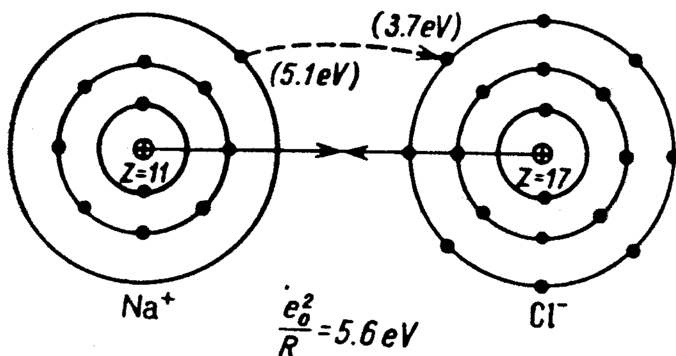
* تساوى الطاقة E_{Na} عمل القوى الخارجية اللازم لاقتلاع الالكترون من الذرة . ($W = -E_{Na} > 0$)

غير أن هذه الطاقة تعوضت أثناء تشكل الجزىء بطاقة $E_{Cl} = 3{,}7\,eV$ ، التجـــاذب الكولونية $E_{coul} = \frac{e_0^2}{R}$ - بيـــن الشاردتيـــن Na^+ و Cl^- (الشكل ٢٧ ـ ٣) ، ويمكن كتابة طاقة ارتباط الذرات فى الجزىء كما يلى :

$$- E_{Na\,Cl} = + E_{Na} - E_{Cl} - E_{coul}$$



الشكل ٢٧ ـ ٢ . ذرتا الصوديوم والكلور المعتدلتان والمستقلتان . النقط السود تشير إلى الالكترونات ، النقط البيض تشير إلى الأمكنة الفارغة التى يمكن أن تشغلها الالكترونات نتيجة لطاقة التآلف .



الشكل ٢٧ ـ ٣ . تشكل جزىء NaCl من شاردتى Na^+ و Cl^- ، ما بين الأقواس يشير إلى طاقة تأين الصوديوم (5,1eV) وطاقة التآلف لذرة الكلور مع الالكترون (3,7eV) ، حيث تساوى طاقة الارتباط الكولونية بين الشاردتين فى الجزىء 5,6eV .

وهذه الطاقة معروفة جيدا من المعطيات التجريبية وتساوى $E_{NaCl} = 4,2eV$ – ونستطيع حساب الطاقة الكولونية وأبعاد الجزىء على الترتيب كما يلى :

$$-E_{coul} = -E_{NaCl} - E_{Na} + E_{cl} = 5,6eV$$

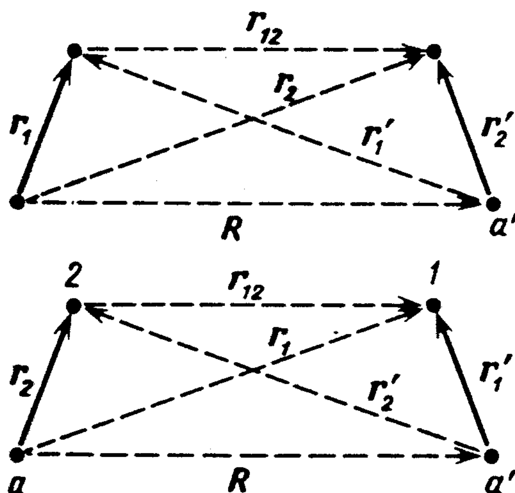
وبحساب R نجد أن :

$$R = 2,5 \cdot 10^{-8}cm$$

وهما نتيجتان معقولتان جدا . هذا ويجب التنويه أنه فى مناقشاتنا السابقة لم نحسب كل التفاعلات التى يمكن أن تحدث فى الجزئيات مختلفة الأقطاب ، وفى الحقيقة يجب أن تؤثر بجانب القوى الكولونية قوى تدافع (على مسافات قصيرة) لا تسمح للذرات بالاقتراب من بعضها بأقل من R ، وعلى كل حال تسمح هذه الدراسة المبسطة باظهار الخطوط العامة (من وجهة نظر فيزيائية) لنشوء الجزيئات مختلفة الأقطاب وكذلك فهم تفكك (ولو كيفيا) هذه الجزيئات إلى شوارد فى المحاليل .

جـ) **الجزيئات متجانسة الأقطاب** . بجانب الرابطة الأيونية التى تحدثنا عنها توجد جزيئات لا تتشكل من الشوارد وإنما تتشكل مباشرة من الذرات المعتدلة ويعتبر جزىء الهيدروجين أبسطها ، وقد سميت مثل هذه الجزيئات بالجزيئات الذرية أو المتجانسة الأقطاب . ونلاحظ أنه لا يمكن فهم تشكل الجزيئات متجانسة الأقطاب ، حتى كيفيا ، على أساس كلاسيكى أو نصف كلاسيكى (مفاهيم بور) ، ويمكن لهذه النظريات أن تساهم فى فهم الارتباطات الجزيئية عندما يكون تشكل هذه الجزيئات ناتجا عن قوى ذات منشأ كهربائى كالجزيئات مختلفة الأقطاب مثلا . ولقد وضع نظرية أبسط

الجزيئات متجانسة الأقطاب للمرة الأولى عام ١٩٢٧ كل من هايتلر ولندن حيث أخذا فرضية القوى التبادلية الكوانتية بعين الاعتبار ، واستنادا فى حساباتهما على طرائق نظرية الاضطراب ، وبالرغم من أن هذه الطريقة لا تعطى نتائج مقدارية جيدة تماما (لأن وسيط النشر ليس صغيرا جدا) لكنها سمحت كليا بإكشاف الطبيعة الفيزيائية لنشوء الروابط متجانسة الأقطاب* . ويتألف جزىء الهيدروجين من بروتونين (نواتين) a و a' (الشكل ٢٧ ـ ٤) والكترونين رقما بالدليلين 1 و 2 ، ولنرمز بـ R المسافة



الشكل ٢٧ ـ ٤ . مخططا التأثير المتبادل فى جزىء H_2 ، حيث تشير الخطوط المتصلة إلى الجسيمات ذات التفاعل المحسوب فى التقريب الصفرى ، أما الخطوط المتقطعة فتشير إلى التفاعلات الشبيهة بالاضطرابات ؛ a و a' ـ نواتا ذرتى الهيدروجين ؛ 1 و 2 ـ الالكترونات .

بين النواتين ، تلك المسافة التى يمكن اعتبارها مقدارا ثابتا أثناء دراسة حركة الالكترونات (التقريب الأدياباتى) ، ولنرمز بـ r_1 و r_2 لأنصاف الأقطار

* يمكن الحصول على نتائج أكثر دقة باستخدام طريقة التغايرات (كما فعلنا عند دراسة ذرة الهليوم) التى تؤمن أيضا دراسة تشكل جزيئات متجانسة الأقطاب أكثر تعقيدا .

الشعاعية المحددة لمكان الالكترونين الاول والثانى بالنسبة للنواة a و r_1' ، r_2' - بالنسبة للنواة a' يكون عندئذ :

$$r_1' = r_1 - R, \quad r_2' = r_2 - R \qquad (27.1)$$

ويمكن أن تكتب معادلة شرودينجر لجزىء الهيدروجين بالشكل التالى :

$$(E - H)\psi(r_1, r_2) = 0 \qquad (27.2)$$

مع العلم أنه توجد فى الهاملتونيان التالى :

$$H = T + V_{aa'} + V_{a'a} + V_{12} \qquad (27.3)$$

ستة طاقات كولونية ممكنة للتفاعل بين الالكترونات والنواتين وهى :

$$V_{a'a} = -\frac{e_0^2}{r_1'} - \frac{e_0^2}{r_2} \qquad V_{aa'} = -\frac{e_0^2}{r_1} - \frac{e_0^2}{r_2'} \qquad (27.4)$$

$$V_{12} = \frac{e_0^2}{R} + \frac{e_0^2}{r_{12}}$$

وباعتبار أنه عندما $R = \text{const}$ يكون

$$\nabla_1 = \nabla_1', \quad \nabla_2 = \nabla_2' \qquad (27.5)$$

ولذلك يمكن كتابة مؤثر الطاقة الحركية بدلالة الاحداثيات ذات الشرطة (r_1') أو بدون الشرطة (r_1) أى أن :

$$T = T_1 + T_2$$

حيث :

$$T_1 = \frac{1}{2m_0}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_1\right)^2 = \frac{1}{2m_0}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_1'\right)^2 \qquad (27.6)$$

$$T_2 = \frac{1}{2m_0}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_2\right)^2 = \frac{1}{2m_0}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_2'\right)^2 \qquad (27.7)$$

ولحل هذه المسألة بطريقة نظرية الاضطراب يجب تقسيم الهاملتونيان

(27.3) إلى قسمين : قسم يتعلق بالتقريب الصفرى وآخر يتعلق بالتقريب الأولى ، وهنا توجد حالتان :

الحالة الأولى : يتوضع الالكترون 1 بجانب النواة a ويقع الالكترون 2 بجانب النواة a' (القسم العلوى من الشكل ٢٧ ـ ٤) وعندئذ نكتب الهاملتونيان الخاص بالتقريب الصفرى كما يلى :

$$H^0_{aa'} = T + V_{aa'} \qquad (27.8)$$

أما طاقة الاضطراب فتساوى :

$$V'_{aa'} = V_{a'a} + V_{12} \qquad (27.9)$$

ويحقق التابع الموجى ، فى التقريب الصفرى ، المعادلة :

$$(E^0 - T - V_{aa'})\,\psi_{aa'} = 0 \qquad (27.10)$$

وبما أن التقريب الصفرى يصف ذرتين غير مرتبطتين فيجب أن يساوى تابعهما الموجى جداء التابعين الموجيين اللذين يصفان حركة الالكترون فى كل من ذرتى الهيدروجين المعزولتين ، أى أن :

$$\psi_{aa'} = \psi_a(\boldsymbol{r}_1)\,\psi_{a'}(\boldsymbol{r}'_2) \qquad (27.11)$$

مع العلم أن $\psi_{a'}$ و ψ_a يحققان المعادلتين :

$$\left(E_a - \frac{1}{2m_0}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_1\right)^2 + \frac{e_0^2}{r_1}\right)\psi_a(\boldsymbol{r}_1) = 0 \qquad (27.12)$$

$$\left(E_{a'} - \frac{1}{2m_0}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla'_2\right)^2 + \frac{e_0^2}{r'_2}\right)\psi_{a'}(\boldsymbol{r}'_2) = 0 \qquad (27.13)$$

أما الطاقة E^0 فتساوى :

$$E^0 = E_a + E_{a'}$$

وإذا فرضنا أن الالكترونين فى كل من الذرتين موجودان فى الحالة الأساسية

$1s\,(n = 1, l = m = 0)$ فيكون كل من تابعهما الموجى وطاقتهما ، انظر البند ١٢ ، عندئذ

$$\psi_a(r_1) = \psi_1(r_1), \quad \psi_{a'}(r_2') = \psi_1(r_2') \qquad (27.14)$$

حيث

$$\psi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}, \quad E_a = E_{a'} = -R\hbar = -\frac{e_0^2}{2a_0} \qquad (27.15)$$

$$\psi_{aa'} = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{r_1 + r_2'}{a_0}} \quad E^0 = -2R\hbar = -\frac{e_0^2}{a_0} \qquad (27.16)$$

و $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2}$ ـــ نصف قطر مدار بور .

الحالة الثانية : يقع الالكترون 2 بجانب النواة a ويقع الالكترون 1 بجانب النواة a' (القسم السفلى للشكل ٢٧ ـ ٤) وعندئذ يساوى الهاملتونيان الخاص بالتقريب الصفرى وطاقة الاضطراب ، على الترتيب ما يلى :

$$\mathrm{H}^0_{a'a} = \mathrm{T} + V_{a'a} \qquad (27.17)$$

$$V'_{a'a} = V_{aa'} + V_{12} \qquad (27.18)$$

ويعطى التابع الموجى والطاقة فى هذا التقريب الصفرى بالعلاقتين التاليتين :

$$\psi_{a'a} = \psi_a(r_2)\,\psi_{a'}(r_1') = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{r_2 + r_1'}{a_0}}, \quad E^0 = -2R\hbar = -\frac{e_0^2}{a_0} \qquad (27.19)$$

وهكذا نستطيع كتابة الطاقة الكلية والتابع الموجى فى التقريب الصفرى بالشكل :

$$E^0 = -2R\hbar = -\frac{e_0^2}{a_0}$$
$$\psi^0 = C_1\psi_{aa'} + C_2\psi_{a'a} \qquad (27.20)$$

ويعود عدم التعيين فى عبارة ψ^0 إلى أن وجود الالكترونين يخلق انطباقا اضافيا سببه عدم امكانية التفريق بين هذين الالكترونين ، ولحل المعادلة (27.2) بطريقة نظرية الاضطراب يجب أن نكتب :

$$E = E^0 + E' + \dots$$
$$\psi = \psi^0 + \psi' + \dots \qquad (27.21)$$

ولنبدل (27.21) فى (27.2) ونقتصر على كتابة حدود التقريب الأول فقط فنجد :

$$(E^0 - T - V_{aa'} - V_{a'a})\,\psi' = -C_1(E' - V'_{aa'})\,\psi_{aa'} - C_2(E' - V'_{a'a})\,\psi_{a'a} \qquad (27.22)$$

وإذا وصف التابع الموجى للتقريب الأول ψ' الوضع الذى يكون فيه الالكترون 1 قرب النواة a فإن الحد $V_{a'a}\,\psi'$ الموجود فى المعادلة (27.22) سيكون مقدارا من المرتبة الثانية فى الصغر ويمكن أن يهمل ، وكذلك نستطيع اهمال الحد $V_{aa'}\,\psi'$ إذا وقع الالكترون 2 قرب النواة a ، ومن المعادلة الأخيرة نحسب الطاقة الاضافية E' والعلاقة بين المعاملين C_1 و C_2 طالما أن طاقة الاضطراب كما فى ذرة الهليوم تزيل الارتباط الناتج عن عدم امكانية التفريق بين الالكترونين ، ولحل المسألة السابقة نستفيد (كما فعلنا فى نظرية الهليوم) من النظرية التى تقول ان حل المعادلة ، وهى المعادلة (27.22) ، بدون طرف أيمن فى حالتنا هذه يجب أن يكون متعامدا مع الطرف الأيمن من المعادلة ذات الطرف الثانى ، وإذا فرضنا أن الالكترون 1 يقع قرب النواة a نجد أن حل المعادلة (27.22) بدون طرف ثان هو التابع $\psi_{aa'}$ الذى يعطى تعامده مع الطرف الأيمن ، المساواة التالية :

$$C_1 \int \psi_{aa'} (E' - V'_{aa'}) \psi_{aa'} d^6x + C_2 \int \psi_{aa'} (E' - V'_{a'a}) \psi_{a'a} d^6x = 0$$ (27.23)

حيث : $d^6x = d^3x_1 \, d^3x_2$ وبنفس الطريقة تماما نرى أن التابع $\Psi a'a$ يجب أن يكون متعامدا مع الطرف الأيمن وهذا ما يؤدى إلى المعادلة التالية :

$$C_2 \int \psi_{a'a} (E' - V'_{a'a}) \psi_{a'a} d^6x + C_1 \int \psi_{a'a} (E' - V'_{aa'}) \psi_{aa'} d^6x = 0$$ (27.24)

ولنأخذ الآن بعين الاعتبار التكاملات التالية :

أ - شرط المعايرة :

$$\int \psi_{aa'} \psi_{aa'} d^6x = \int \psi_1^2 (\boldsymbol{r}_1) \, d^3x_1 \int \psi_1^2 (\boldsymbol{r}_2) \, d^3x_2 = 1$$ (27.25)

ب - مربع تكامل التداخل :

$$\int \psi_{aa'} \psi_{a'a} d^6x = \int \psi_{a'a} \psi_{aa'} d^6x = S^2$$ (27.26)

حيث

$$S = \int \psi_1 (\boldsymbol{r}_1) \, \psi_1 (\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{R}) \, d^3x_1$$ (27.26a)

جـ - تفاعل الذرات الكولونى :

$$K = \int \psi_{aa'}^2 (V_{a'a} + V_{12}) \, d^6x$$ (27.27)

د - التفاعل التبادلى للذرتين :

$$A = \int \psi_{a'a} \psi_{aa'} (V_{a'a} + V_{12}) \, d^6x$$ (27.28)

ويمكن فى عبارات ما تحت التكامل السابقة استبدال r_1 بـ r_2 و r_2 بـ r_1 وهذا ما يكافىء تغير الدليلين a و a' ، فإذا أخذنا بعين الاعتبار التكاملات (27.25) - (27.28) وكذلك الملاحظة الأخيرة فإنه يمكن كتابة المساوتين (27.23) و (27.24) بالشكل التالى :

$$C_1(E'-K)+C_2(E'S^2-A)=0$$
$$C_2(E'-K)+C_1(E'S^2-A)=0 \qquad (27.29)$$

مع العلم أن المعاملين C_1 و C_2 يرتبطان فيما بينهما بشرط المعايرة :

$$\int(\psi^0)^2\, d^6x = C_1^2+2C_1C_2S^2+C_2^2=1 \qquad (27.30)$$

ومن المعادلة (27.29) نجد الحلين التاليين :

أ ـ الحل المتناظر :

$$\psi^s=\frac{1}{\sqrt{2(1+S^2)}}(\psi_{aa'}+\psi_{a'a}) \qquad (27.31)$$

$$E'^s=U^s(R)=\frac{K+A}{1+S^2} \qquad (27.32)$$

ب ـ الحل اللامتناظر :

$$\psi^a=\frac{1}{\sqrt{2(1-S^2)}}(\psi_{aa'}-\psi_{a'a}) \qquad (27.33)$$

$$E'^a=U^a(R)=\frac{K-A}{1-S^2} \qquad (27.34)$$

ويمثل التابعان $U^s(R)$ و $U^a(R)$ الطاقة الكمونية لتفاعل الذرتين (انظر البند السابق) والمقابلة للحالتين المتناظرة واللامتناظرة ولحسابهما لا بد قبل كل شيء من حل التكاملات التى تحدد تبعية كل من S و K و A لـ R ، ويمكن حل جميع هذه التكاملات بتعويض التوابع الموجية (27.16) و (27.19) بالعبارات (27.26) - (27.28) ، وهكذا نحصل بعد حسابات غير معقدة على العبارة التالية :

$$S=e^{-\frac{R}{a_0}}\left\{1+\frac{R}{a_0}+\frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right\} \qquad (27.35)$$

وكما هو متوقع فإن هذا المقدار ينتهى إلى الواحد عندما $R\to 0$ (شرط

المعايرة) وينتهى إلى الصفر عندما $R\to\infty$ (لذرات معزولة) ، وإذا تحققت العلاقة $R \ll a_0$ (قيم R صغيرة جدا) نجد أن :

$$S^2 = 1 - \frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2 + \frac{1}{9}\left(\frac{R}{a_0}\right)^4 - \dots \qquad (27.36)$$

ملاحظة : يمكن أن نحسب المقدار S كما يلى : نكتب التابع الموجى للحالة الاساسية لذرة الهيدروجين ، انظر (27.15) ، بشكل تكامل فورييه :

$$\psi_1(r) = \frac{k_0^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-rk_0} = \left(\frac{k_0}{\pi}\right)^{5/2} \int \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{(k^2+k_0^2)^2} d^3k$$

حيث

$$k_0 = \frac{1}{a_0}$$

ثم نعوض هذا النشر فى (27.26a) ونأخذ بعين الاعتبار العلاقة :

$$\int e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{r}} d^3x = 8\pi^3 \delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')$$

فنجد أن

$$S = \frac{8k_0^5}{\pi^2}\int \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}{(k^2+k_0^2)^4} d^3k$$

ولحساب التكامل الأخير نستفيد من المساواة :

$$\frac{1}{2\pi^2}\int \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}{k^2+k_0^2} d^3k = \frac{e^{-k_0R}}{R}$$

والتى بمفاضلتها ثلاث مرات بالنسبة لـ k_0^2 نحصل على المقدار المعطى S بالعلاقة (27.35) ، ولا يمكن للتفاعل التبادلى A أن يتمثل بشكل توابع بسيطة ، وقد برهن الفيزيائى اليابانى سوجيورا أنه يمكن التعبير عن A بالشكل التالى :

$$A = 2A_1S + A_2 + \frac{e_0^2}{R}S^2 \qquad (27.36a)$$

حيث

$$A_1 = -\frac{e_0^2}{a_0} e^{-R/a_0}\left(1+\frac{R}{a_0}\right),$$

$$A_2 = \frac{1}{5}\frac{e_0^2}{a_0}\left\{-e^{-2R/a_0}\left[-\frac{25}{8}+\frac{23}{4}\frac{R}{a_0}+3\left(\frac{R}{a_0}\right)^2+\frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_0}\right)^3\right]+ + 6\frac{a_0}{R}\left[S^2\left(C+\ln\frac{R}{a_0}\right)+S'^2\,\mathrm{Ei}\left(-4\frac{R}{a_0}\right)-2SS'\,\mathrm{Ei}\left(-2\frac{R}{a_0}\right)\right]\right\}$$

حيث S هو تكامل التداخل (27.35) أما S' فيساوى :

$$S' = e^{R/a_0}\left[1 - \frac{R}{a_0} + \frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right]$$

وأما C فهو ثابت أويلر التالى :

$$C = \int_0^1 \frac{1 - e^{-t}}{t}\, dt - \int_1^\infty \frac{e^{-t}}{t}\, dt \approx 0.57722$$

وأخيرا $\mathrm{Ei}(-x)$ هو التابع الأسى التكاملى التالى :

$$\mathrm{Ei}(-x) = -\int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t}\, dt, \qquad x > 0$$

وبطريقة مشابهة نحصل على عبارة الطاقة الكولونية (27.27) فنجد أن :

$$K = \frac{e_0^2}{R} e^{-2R/a_0}\left\{1 + \frac{5}{8}\frac{R}{a_0} - \frac{3}{4}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2 - \frac{1}{6}\left(\frac{R}{a_0}\right)^3\right\} \qquad (27.37)$$

ومن أجل قيم R الصغيرة جدا ($R \ll a_0$) يكون :

$$K = \frac{e_0^2}{R}\left\{1 - \frac{11}{8}\frac{R}{a_0} + \frac{5}{4}\left(\frac{R}{a_0}\right)^3 + \dots\right\} \qquad (27.38)$$

وبنفس الطريقة تماما نجد أن العبارة (27.36a) تؤول بعد حسابات معقدة عندما $R \ll a_0$ إلى ما يلى :

$$A = \frac{e_0^2}{R}\left\{1 - \frac{11}{8}\frac{R}{a_0} - \frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2 + \frac{13}{12}\left(\frac{R}{a_0}\right)^3 + \dots\right\} \qquad (27.39)$$

ولنحسب أخيرا تغير الطاقة الكامنة لتفاعل ذرتى الهيدروجين تبعا لتناظر حالاتهما ، وهنا سنقتصر على قيم R الصغيرة جدا ($R \ll a_0$) لأن هذا التقريب كاف تماما لهذه النتائج التى لها طبيعة كيفية ، والطاقة الكامنة فى الحالة المتناظرة تساوى طبقا لـ (27.32) إلى :

$$U^s(R) = \frac{K + A}{1 + S^2} = \frac{e_0^2}{R}\left(1 - \frac{11}{8}\frac{R}{a_0} + \dots\right) \qquad (27.40)$$

أما فيما يخص الحالة اللامتناظرة ، انظر (27.34) ، فإننا نحصل على ما يلى

$$U^a(R) = \frac{K - A}{1 - S^2} = \frac{e_0^2}{R}\left(1 + \frac{1}{2}\frac{R}{a_0} + \ldots\right) \qquad (27.41)$$

ومن الواضح من الصيغ السابقة أن التفاعل بين الذرات عندما $R \to 0$ ناتج بصورة رئيسية عن طاقة التدافع الكولونى ($U > 0$) للنواتين ، أما فى الحالة اللا متناظرة عندما تكبر R ، انظر (27.41) ، فيصبح هذا التفاعل أكثر قوة ولهذا تتشكل الجزيئات ، وعلى العكس من ذلك نرى فى الحالة المتناظرة أن طاقة التفاعل (27.40) أصغر من طاقة التدافع الكولونية حتى أن هذه الطاقة قد تصبح سالبة عندما تكون $R > \frac{8}{11} a_0$ أى أنها تسبب تجاذبا ($U < 0$) وبما أن المضروب e^{-2R/a_0} يجب أن يبدأ بالتأثير عندما $R \to \infty$ فيجب أن تنتهى القيمة المطلقة للطاقة الكامنة إلى الصفر عند ازدياد R ويوضح الشكل ٢٧ ـ ٥ المنحنيات البيانية التى تم الحصول عليها نظريا (دون النشر بـ R / a_0) وتجريبيا ، وتعطى القيم النظرية التى تم الحصول عليها من الخطوط البيانية التى وضعها هايتلر ولندن للحالة المستقرة وتعطى قيمة R_0 التالية :

$$R_0 = 1{,}518\, a_0 = 0{,}80 \ \text{Å}$$

وعندئذ تساوى طاقة التفكك إلى :

$$D = -U(R_0) = 3{,}14\text{eV}$$

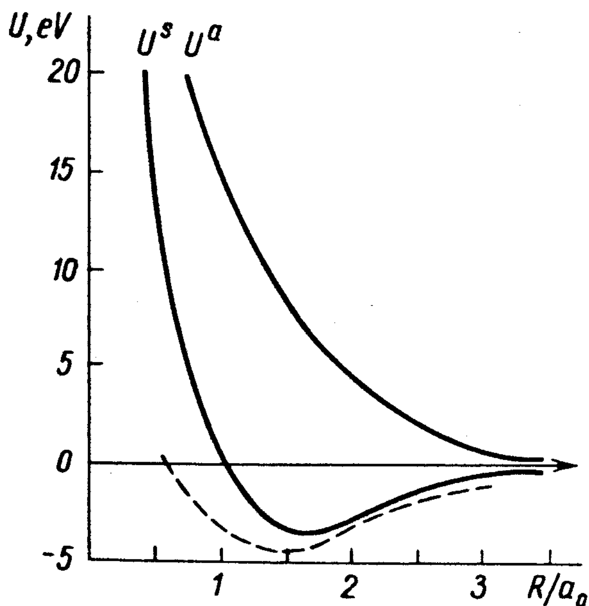
وفى نفس الوقت نرى أن القيم التجريبية المقابلة هى التالية :

$$R_0^{\text{exp}} = 0{,}7395\text{Å}, \quad D^{\text{exp}} = 4{,}48 \ \text{eV}$$

(وقد استثنيت الطاقة الصفرية من هذه الدراسة*) . ويعود سبب هذا

---

* يجب ملاحظة أنه إذا حسبنا التقريب الثانى بطريقة هايتلر ولندن تكون طاقة الاضطراب المقابلة ملائمة لوصف قوى فان ديروالس أى طاقة تفاعل الذرات على مسافات كبيرة نسبيا بين النوى .



الشكل ٢٧ ـ ٥ . منحنيات تغير الطاقة الكامنة فى تفاعل ذرتين الهيدروجين للحالتين المتناظرة (U^s) واللا متناظرة U^a ولقد مثلت النتائج التجريبية بخط متقطع .

التباعد بين المعطيات التجريبية والنظرية فى هذه الحالة ، كما فى حالة ذرة الهليوم ، إلى أن لطاقة الاضطراب نفس مرتبة طاقة التقريب الصفرى ، أما إذا حلت هذه المسألة بطريقة التغايرات ، (كما تم دراسة ذرة الهليوم بطريقة هيلراس) ، وذلك بأن نأخذ بمثابة تابع الأختبار التابع التالى :

$$\Psi_a = \left(\frac{Z'^3}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} e^{-Z'r/a_0} \qquad (27.42)$$

حيث Z' هى الشحنة الفعالة للنواة (وهى تلك الشحنة التى تعتبر وسيط التغاير) ، فإننا سنحصل على القيمتين التاليتين لـ R_0 و D ، واللتين حسبهما وانــج ، واللتين تتطابقان أكثر مع التجربة وهما :

$$R_0 = 0{,}76\text{Å}, \quad D^{var} = 3{,}76\,\text{eV}$$

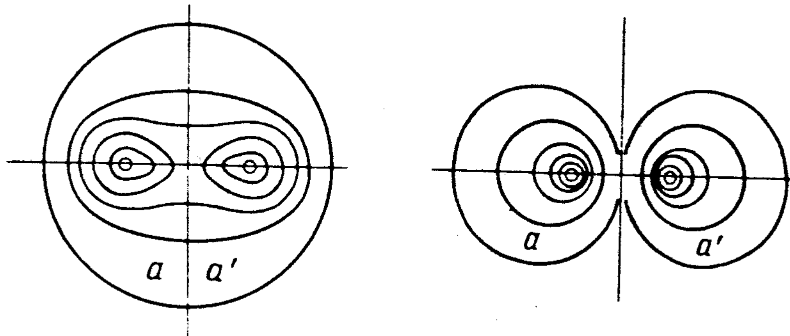
وقد أدى اختيار عدد أكبر من الوسطاء إلى بعض التحسين فى هذه النتائج الحسابية* وعليه فإن كثافة احتمال توزع الالكترونات فى الحالة المتناظرة تساوى :

$$\rho_0^s = (\psi^s)^2 = \frac{1}{2(1+S^2)}\left[\psi_{aa'}^2 + \psi_{a'a}^2 + 2\psi_{aa'}\psi_{a'a}\right] \qquad (27.43)$$

وإذا حسبنا نفس الكثافة للحالة اللامتناظرة فإننا نجد :

$$\rho_0^a = (\psi^a)^2 = \frac{1}{2(1-S^2)}\left[\psi_{aa'}^2 + \psi_{a'a}^2 - 2\psi_{aa'}\psi_{a'a}\right] \qquad (27.44)$$

وإذا رسمنا المنحنيات التى تمثل كثافة الالكترونات (الشكل ٢٧ ـ ٦) نجد أن احتمال وجود الالكترونات فى منتصف الخط الواصل بين النواتين يكون



الشكل ٢٧ ـ ٦ . توزع كثافة الالكترونات فى شاردة جزىء الهيدروجين .

أعظميا من أجل الحل المتناظر وعلى العكس من ذلك ينتهى هذا الاحتمال إلى الصفر من أجل الحل اللامتناظر ، وبما أن الالكترونات تربط النواتين

* توفر الآلات الحاسبة (الكومبيوترات) الحسابات العددية نظريا لجزىء الهيدروجين باستعمال أكثر من مئة وسيط وعندئذ لن يلاحظ عمليا أى اختلاف بين النظرية والتجربة . وهذا يعنى مبدئيا أن نظرية هايتلر ولندن تصف كل خواص تشكل جزىء الهيدروجين ، أما الفرق بين النظرية والتجربة فيمكن رده إلى النقص الرياضى لطريقة الاضطراب عند تطبيقها على هذه الذرة .

فى النقطة المركزية بقوة أكثر ، فمن الطبيعى أن نتوقع أن الحل الأول يؤدى إلى تشكيل الجزىء بسرعة أكثر من الحل الثانى ، وعند اقتراب النواتين فى حالة الحل الأول المتناظر فإن المنحنيين اللذين يمثلان توزع الالكترونات حول النواة يبدوان وكأنهما يتمازجان ببعضهما ، وهذا ما يميز بوضوح الارتباط متجانس الأقطاب .

د) **المغزل وتناظر الحالات** . يلعب المغزل دورا جوهريا فى نظرية ذرة الهيدروجين بالرغم من أن القيمة المطلقة للتفاعلين المغزلى المدارى والمغزلى المغزلى تعطى تصحيحا صغيرا ، وفى جزىء الهيدروجين ، كما فى ذرة الهليوم ، تحدد الاتجاهات المشتركة لمغزل الالكترونين خواص تناظر القسم الفراغى من التابع الموجى ، هذا التناظر الذى يلعب دورا هاما فى مسائل استقرار الجزيئات ، ولهذا ندرس بالتفصيل مسألة ارتباط المغزل بخواص تناظر الجسيم ، حيث يحتوى التابع الموجى الكلى ψ على قسم مغزلى بجانب القسم الاحداثى ويمكن فى حالتنا اللانسبية اهمال الطاقة الكامنة للتفاعل المغزلى المدارى ولهذا ، كما فى رابطة رسيل - ساندرس ، يمكن فصل التابع الكلى إلى جداء القسمين المغزلى والاحداثى ، فإذا اعتبرنا أن التابع الموجى للالكترونات (احصاءات فيرمى) يجب أن يغير اشارته عند تبديل الاحداثيات والمغازل (الحل اللامتناظر) فإننا نجد الاحتمالين التاليين :

$$\psi_1 = C^a(s_1,\ s_2)\,\psi^c(r_1,\ r_2) \qquad (27.45)$$

$$\psi_2 = C^s(s_1,\ s_2)\,\psi^a(r_1,\ r_2) \qquad (27.46)$$

ولقد برهنا فى البند ٢٤ أن الحل الذى يحوى التابع المغزلى اللامتناظر C^a والتابع الاحداثى المتناظر ، انظر (27.45) ، هو والذى يوافق حالة مغزلها يساوى الصفر (المغازل متعاكسة مباشرة) ، وهكذا نرى أن التابع المغزلى المتناظر C^s مع التابع الاحداثى اللامتناظر ψ^a يصف الحالة حيث

يكون المغزل الكلى مساو الواحد (المغازل متوازية* أو متسايرة) ، وفى جزىء الهيدروجين يقود الحل الاحداثى المتناظر إلى قوى التجاذب ، فالحالة المستقرة للجزىء تقابل المغازل المتعاكسة مباشرة للالكترونات . وننتقل الآن إلى التحليل العام لحالات الجزىء على أساس التناظر ، وبهذه المناسبة نلاحظ أن الحقل القوى فى الجزيئات ذات الذرتين تناظرا محوريا بالنسبة للخط الواصل بين النواتين (محور تناظر الجزىء) ويرمز للقيمة المطلقة لمسقط العزم المدارى الكلى على محور التناظر بالرمز Λ ، أما الحالات الخاصة المختلفة بـ Λ فيرمز لها بالرموز $\Sigma (\Lambda = 0)$ ، $\Pi (\Lambda = 1)$ ، $\Delta (\Lambda = 2)$ . . . إلى آخره . واضافة إلى ذلك يجب أن نميز كل حالة الكترونية بالمغزل الكلى S لكل الالكترونات فى الجزىء حيث توجد $\nu = 2S + 1$ حالة كوانتية من أجل قيمة محددة لـ S ، وكما فى حالة الذرة ، تتعين تعددية الحد بالمقدار ν وإذا انعدم المغزل الكلى $S = 0$ فإن $\nu = 1$، وتساوى التعددية $\nu = 3$ عندما $S = 1$ ، وهكذا يتعين مغزل الالكترونات بالتعددية ν ويرمز للحد المقابل بالرمز $^{\nu}\Lambda$ ، وطبقا لهذه الرموز تقابل الحالة المتناظرة للقسم الاحداثى من التابع الموجى Ψ^s (حالة واحدة) الحد $^1\Sigma (\Lambda = 0, S = 0, \nu = 1)$ ، أما الحالة اللامتناظرة Ψ^a(ثلاث حالات**) فتقابل الحد $^3\Sigma (\Lambda = 0, S = 1, \nu = 3)$ ، وسنرى كيف يتغير مسقط العزوم على محور التناظر z بالانعكاس المرآوى فى مستو يمر من هذا المحور*** ، وسنقتصر توخيا للتبسيط دراسة الحالات التى ينعدم فيها

---

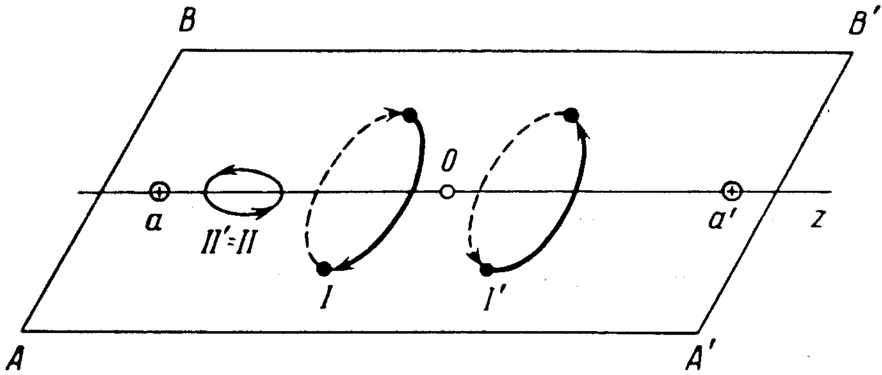
* تعطى التوابع المغزلية المتناظرة واللامتناظرة ، كما فى ذرة الهليوم بالعلاقتين (24.39) و (24.40) .

** يمكن أن يكون اتجاه المغزل موازيا أو معاكسا أو معامدا لمحور التناظر .

*** من المعلوم أن العزم الحركى الذى يساوى الجداء الشعاعى $L = [rp]$ هو شعاع محورى مشروط بالاتجاه (له اتجاه فى جملة احداثية يمينية واتجاه آخر عكس الأول فى جملة يسارية) ولكن اتجاه المنحنى المغلق الذى يحيط بالسطح المرسوم على المتجهين r, p، لا يتغير بالنسبة للجملة يسارية كانت أم يمينية وبالعكس ، ونفس الملاحظة تطبق على المغزل الذى يميز إما بشعاع محورى أو بمنحن مغلق يدل على اتجاه الاستقطاب الدائرى .

العزم المدارى أى A = 0 (الحد ـ Σ) . فإذا انعدم أيضا المغزل الكلى للالكترونات أى S = 0 فلن يحدث أى تغيير بالانعكاس المرآوى ، وعندما يتوازى مغزلا الالكترونين (S = 1) نجد الأوضاع التالية :

١ ـ مسقط المغزل على محور التناظر يساوى الصفر ($S_z = 0$) وعندئذ لا يتغير الدوران المميز للمغزل فى المستوى الذى يقع فيه ، نتيجة لهذا الانعكاس المرآوى (الشكل ٢٧ ـ ٧) حيث رمز للمغزل البدائى (قبل



الشكل ٢٧ ـ ٧ . تغير العزم الحركى بالانعكاس فى المستوى $AA'B'B$ المار من محور التناظر ، إذا حدث الدوران المميز للعزم الحركى فى المستوى المتعامد مع $AA'B'B$ (انظر I) فإن اتجاه الدوران بعد الانعكاس سيكون معاكسا (انظر I) ، أما إذا حدث الدوران فى مستوى الانعكاس فإن اتجاه الدوران لا يتغير بالانعكاس المرآوى ($II' = II$) .

الانعكاس) بالرمز II الناتج عن الانعكاس المرآوى ($II = II'$) . ونرمز للحدود المقابلة التى لا تتغير بالانعكاس المرآوى بالرمز Σ^+ .

٢ ـ مسقط المغزل على محوى التناظر z لا يساوى الصفر ($S_z = \pm 1$) . وفى هذه الحالة يغير المغزل الذى يميز الدوران اتجاهه إلى الاتجاه المعاكس وكنتيجة لهذا الانعكاس المرآوى (انظر الشكل ٢٧ ـ ٧ ، المغزل الابتدائى I الذى يميز الدوران والمغزل المنعكس

مرآويا I') وسنرمز للحدود المقابلة التي يتغير اتجاه الدوران فيها بالرمز Σ^+ وهكذا تكون ممكنة لجزيء الهيدروجين الحدود التالية :

$$\begin{aligned} &{}^1\Sigma^+ \quad (\Lambda = 0,\ S = 0) \\ &{}^3\Sigma^+ \quad (\Lambda = 0,\ S = 1,\ S_z = 0) \\ &{}^3\Sigma^- \quad (\Lambda = 0,\ S = 1,\ S_z = \pm 1) \end{aligned} \tag{27.47}$$

وقد تظهر خاصة تناظر جديدة معها مميزات اضافية للحدود الجزيئية عندما يتألف الجزيء من ذرتين متشابهتين ، وفي الحقيقة يجب أن تكون للجزيء المؤلف من ذرتين نواتان متشابهتان ومستوى تناظر ومركز تناظر وهذا المركز هو النقطة التي تقسم الخط الواصل بين النواتين إلى قسمين متساويين ، وهذه النقطة هي مركز الاحداثيات في الشكل ٢٧ ـ ٧ أي النقطة $z = 0$ ، ويجب تغيير احداثيات كل الالكترونات أثناء التحويل التناظري وإذا طبقنا ذلك بصورة خاصة على جزيء الهيدروجين (بفرض ثبات النواتين) فلا بد أن يتبادل الالكترونان 1 و 2 في هذا التحويل التناظري (أي يأخذ الالكترون 1 احداثيات 2 وبالعكس) ، وعندئذ لا يتغير التابع الموجي المتناظر ψ^s أي أنه سيكون زوجيا (وهذا ما رمزنا له بالدليل g) ولكن التابع الموجي اللامتناظر ψ^a يغير اشارته أي يكون فرديا (وهذا ما رمزنا له بالدليل u) ، وهكذا نرمز للحالات الممكنة لجزيء الهيدروجين باعتبار الخاصتين التناظريتين بما يلي :

$${}^1\Sigma_g^+,\quad {}^3\Sigma_u^+,\quad {}^3\Sigma_u^-$$

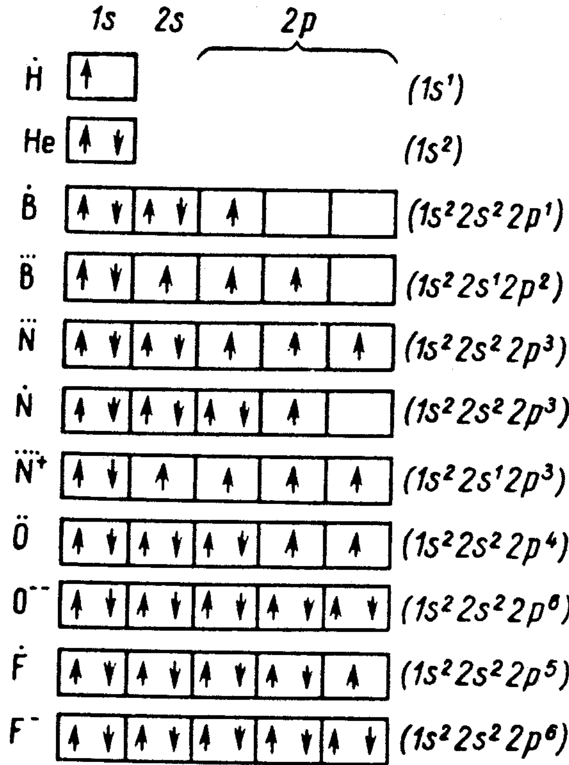
وتتضح بجلاء أهمية التناظر في تشكيل الجزيئات من أنه في أكثرية الجزيئات ذات الذرتين (برهنا ذلك على جزيء الهيدروجين) تتحقق تلك الحالات التي لا يتغير تابعها الموجي بالنسبة لكل أنواع التحويلات التناظرية للجزيء ، أي أن الحد الأساسي لجزيء الهيدروجين هو الحد ${}^1\Sigma_g^+$ ، ولن نستطيع في هذا الكتاب التوقف بالتفصيل عند كل مسائل التناظر ، ويجب

ملاحظة أن لمغزل الالكترونين اتجاهين مختلفين فى الوضع المستقر لجزىء الهيدروجين ومن الثابت أيضا وجود نوعين من جزيئات الهيدروجين سميا بالباراهيدروجين والأرتوهيدروجين ولا يعود هذا الاصطلاح إلى اتجاه مغازل الالكترونين وإنما إلى اتجاه مغازل النواتين ، فبالنسبة للباراهيدروجين يتعاكس مغزل النواتين ولكنهما يتوازيان فى الارتوهيدروجين . وبما أن عدد الحالات الممكنة لجسيمين مغزلاهما متوازيان أكبر بثلاث مرات عندما يكونان متعاكسين فإن الهيدروجين العادى فى درجة حرارة الغرفة يتركب من 25 % باراهيدروجين و 75 % أرتوهيدروجين ، وعند انخفاض درجة الحرارة ، وبوجود عامل مساعد (الفحم مثلا) ، تزداد نسبة الباراهيدروجين فى هذا المزيج المتوازن وتبلغ 100 % فى الدرجة 0 K ويكون الباراهيدروجين الذى تم الحصول عليه فى درجات الحرارة المنخفضة مستقرا جدا ويمكن أن يحتفظ به بدرجة حرارة الغرفة عدة أسابيع بهذا الشكل اللامتوازن ، ويستفاد من اختلاف الناقلية (الموصلية) الحرارية فى الدرجات المنخفضة (الناقلية الحرارية أعلى عند الباراهيدروجين) لحساب النسبة المئوية فى المزيج ، وهكذا يوجد بعض الاختلاف بين البارا والارتوهيدروجين فى طاقة التفكك وفى الخواص الضوئية .

هـ) **نظرية التكافؤ** . سندرس الآن المفهوم الكيميائى من وجهة نظر الميكانيكا الكوانتية . ان التكافؤ هو خاصة من خواص ذرات عنصر ما يتم بموجبها الاتحاد بينه وبين عدد معين من ذرات عنصر آخر ، ولقد ذكرنا سابقا أن النجاح الأول للنظرية الكوانتية فى مجال الخواص الكيميائية للذرات تبين أثناء تفسير المركبات الكيميائية مختلفة الأقطاب (نظرية كوسل) التى يعود سبب تشكلها إلى اعادة توزيع الالكترونات على الطبقات الخارجية للذرة ، وطبقا لهذه النظرية تتعين القيمة العددية للتكافؤ (للجزيئات مختلفة

الأقطاب) بعدد الالكترونات التى تعطيها ذرة ما إلى أخرى (التكافؤ الأيونى الموجب) أو تأخذها منها (التكافؤ الأيونى السالب) وعند تشكيل الجزيئات يعاد توزيع الالكترونات على الغمامات الخارجية للذرات بحيث يتشبع تكافؤ الذرات ، أما النجاح الآخر للنظرية الكوانتية فى أبحاث تشكل الذرات فقد تجسد فى نظرية هايتلر ولندن التى استطاعت تفسير تكوين أبسط جزىء متجانس الأقطاب وهذا ما يشكل بحد ذاته أساس المفاهيم الحديثة فى ما يسمى الرابطة المشتركة ، وطبقا لهذه النظرية يحدث تعويض متبادل لمغازل الكترونات التكافؤ ، ويمكن بتعميم هذه النتائج استخلاص أنه يتم تشكيل الجزيئات متجانسة الأقطاب ضمن شروط التعويض المتبادل لمغازل الكترونات التكافؤ ، فيجب تعيين التكافؤ الكيميائى (متجانس الأقطاب) بعدد الكترونات الطبقة الخارجية ذات المغازل غير المعوضة .

وسندرس بعض الأمثلة الملموسة توخيا لشرح هذه الموضوعات . يوضح الشكل ٢٧ ـ ٨ الحالات الأساسية لبعض عناصر الجدول الدورى ، وقد مثلت الحالات الالكترونية بخلايا والالكترونات بأسهم يوافق توجيهها اتجاه المغزل ، ويتضح من الشكل ٢٧ ـ ٨ أن شكل طبقة الهيدروجين الخارجية ^2S($1s^1$) يوافق رابطة أحادية وأن تكافؤ الهيدروجين الذى يساوى الواحد هو أصغر بواحد من تعددية حدوده التى تساوى 2 (يرمز للتعددية بدليل وضع إلى يسار وأعلى الحد S) وبالنسبة لذرة الهليوم فلها الشكل ($1s^2$) ومنه نجد أن التعددية تساوى الواحد (^1S) أما التكافؤ فيجب أن ينعدم ، أما ذرة البورون ($Z = 5$) فلها الحالة الأساسية ($1s^2\ 2s^2\ 2p^1$) وهذا ما يقابل الثنائية (^2P) وبالتالى يساوى تكافؤها الواحد ، وأما الحالة المثارة ($1s^2\ 2s^1\ 2p^2$) فتوافق الرباعية (^4P) وبالتالى فهى ثلاثية التكافؤ ، وهكذا بكل بساطة يعبر عن وجود عدة تكافؤات لدى عناصر الرموز المختلفة فى الجدول الدورى ، انظر الجدول ٢٧ ـ ٢ . ومن الطريف



الشكل ٢٧ ـ ٨ . مخطط امتلاء الغمامات الالكترونية لبعض الذرات دون اهمال المغزل ، حيث ترمز النقطة إلى التكافؤ متجانس الأقطاب واشارتا « + » أو « − » للتكافؤ الأيونى .

ملاحظة أنه بينما تكون لذرة الاكسجين والهالوجينات طبقا للتجربة عدة تكافؤات فإنه يظهر لذرتى O و F تكافؤ أساسى فقط ويفسر ذلك بالشكل التالى : يجب أن ينتقل الالكترون إلى طبقة ذات قيمة أكبر للعدد الكوانتى الرئيسى وهذا لا يعتبر مناسبا من الناحية الطاقوية (لا توجد الغمامة d إلا عند هذين العنصرين) ، ونلاحظ من الشكل ٢٧ ـ ٨ أن النتروجين فى الحالة الأساسية ($1s^2\ 2s^2\ 2p^3$) هو ثلاثى التكافؤ (لثلاثة الكترونات فى الغمامة $2p$ مغازل متوازية)ولكن قد يكون أحادى (مغزلا الكترونين فى

الجـدول ٢٧ ـ ٢

التعددية فى التكافؤ متجانس الأقطاب

زمـــرة الجدول الدورى	I	II	III	IV	V	VI	VII
التعددية	2	1,3	2,4	1,3,5	2,4,6	1,3,5,7	2,4,6,8
التكافؤ	**1***	**0**,2	**1**,3	**0**,2,4	**1**,3,5	**0**,2,4,6	**1**,3,5,7

* رمز بالحروف السود للتكافؤ الأساسى .

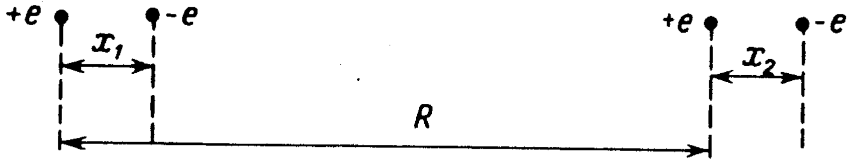
الغمامة $2p$ متعاكسان مباشرة) وحتى خماسى التكافؤ ($1s^2\ 2s^2\ 2p^3$) عندما يضاف إلى التكافؤات المغزلية الأربعة الناتجة عن توازى مغازل الالكترونات فى الغمامتين $2p$ ، $2s$،ويضاف التكافؤ الأيونى الخامس الناتج عن اقصاء الالكترون الثانى من الغمامة $2s$ ، وبهذا الصدد نلاحظ أن التكافؤ الأيونى للأكسجين والفلور متساويان ، ولا يجوز أن تدخل الغازات الخاملة مبدئيا فى أى اتحاد كيميائى لأن مغازل الطبقة الخارجية (s^2, p^6) يجب أن تعوض تماما ، ولكن منذ زمن غير بعيد فى ١٩٦٢ اكتشفت مركبات الغاز الخامل الثقيل $_{54}Xe$ (مثلا XeF_2) . وظهور تكافؤ يساوى 2 ، 4 ، 6 أو 8 لدى الغازات الخاملة ناتج على ما يبدو من أن طاقة ارتباط الجزىء تقطع الارتباط المغزلى-المغزلى لالكترونات الطبقة الخارجية ، وتؤكد أيضا أن التقسيم الصارم للروابط الكيميائية إلى متجانسة ومختلفة الأقطاب بصورة عامة غير دقيق .

ويناسب النوعان السابقان الحالتين القصويين لتوزع الكثافة الالكترونية فى الطبقات الممتلئة ، إذ تقابل حالة اللاتناظر القصوى فى توزع الكثافة الالكترونية بين الذرات الجزىء مختلف الأقطاب،ويكون لهذاالجزىء عزم ثنائى أقطاب ، ويمكن دراسته كتشكيل أيونى ، أما حالة التوزع المتجانس للكثافة الالكترونية بالنسبة لذرتى الهيدروجين فى الجزىء فتقابل الرابطة متجانسة الأقطاب (عزم ثنائى الأقطاب يساوى الصفر) ويمكن أن يكون للهيدروجين تكافؤ أيونى سالب (H^-) إذ انضم إليه عند تشكيل الجزىء ، كما فى الفلور (F^-) الكترون ثان (عزم ثنائى الأقطاب يختلف عن الصفر) .

وتعطى النظرية الكوانتية مدخلا عاما لفهم قوى التكافؤ التى تشكل نوعى الارتباط (المختلف الأقطاب والمتجانس الأقطاب) فى مخطط واحد ، وان احدى حسنات النظرية الكوانتية لجزىء H_2 هو أنها استطاعت تفسير اشباع المركبات متجانسة الأقطاب كأنه اشباع لمغازل الطبقات الالكترونية عند اتحاد الالكترونات فى أزواج ذات مغازل متعاكسة ، ونتيجة لذلك نذكر كحالة خاصة عدم امكانية تشكل الجزىء H_3 لأنه لا يمكن تعويض مغازل ثلاثة الكترونات فى هذه الحالة ؛ ونؤكد فى الختام أن نظرية هايتلر ولندن أعدت فقط لجزىء الهيدروجين H_2 وهو الأبسط ، وبالتالى يكون لتعميم هذه النظرية على الجزيئات المعقدة طبيعة كيفية فقط .

و) **قوى فان ديروالس** . بجانب قوى التكافؤ التى تحدثنا عنها سابقا توجد قوى تجاذب خاصة تسمى بقوى فان ديروالس ، وهى تلعب دورا جوهريا فى التفاعل بين الجزيئات ، ويمكن حسابها فى جزىء الهيدروجين إذا انتقلنا إلى نظرية الاضطراب ، لكننا سنقتصر على مثال واحد ألا وهو تفاعل هزازين . ليكن لهزازين متماثلين عزم ثنائى الأقطاب $p_1 = ex_1$

و $p_2 = ex_2$ ، والمسافة بينهما R أكبر بكثير من أبعاد ثنائى الأقطاب (الشكل ٢٧ ـ ٩) وعندئذ نكتب طاقة التفاعل الكامنة بالشكل التالى :



الشكل ٢٧ ـ ٩ . التأثير المتبادل بين ثنائى أقطاب كهربائيين (**قوة فان ديروالس**) .

$$V = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R + x_2 - x_1} - \frac{e^2}{R + x_2} - \frac{e^2}{R - x_1} \approx \frac{2e^2}{R^3} x_1 x_2 \quad (27.48)$$

وطبقا للنظرية الكلاسيكية ينعدم التأثير بينهما $V = 0$ عندما لا يهتز الهزازان ($x_1 = x_2 = 0$) وطبقا للميكانيكا الكوانتية (انظر البند ٧) يجب أن تحدث اهتزازات صفرية وهذا ما يبقى على التفاعل بين الهزازين حتى ولو لم يكونا متهيجين ، ولندرس الاهتزاز المرتبط لهزازين توافقيين تؤثر بينهما قوى تجاذب طاقتهاالكامنة من الشكل (27.48) ، وعندئذ تأخذ معادلة شرودينجر لهذه الجملة الشكل التالى :

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \alpha - \beta^2 (x_1^2 + x_2^2) - 2\gamma x_1 x_2 \right\} \psi(x_1, x_2) = 0 \quad (27.49)$$

حيث

$$\alpha = \frac{2m_{red}E}{\hbar^2}, \quad \beta = \frac{m_{red}\omega}{\hbar}, \quad \gamma = \frac{2m_{red}e^2}{\hbar^2 R^3}$$

و m_{red} ـ الكتلة* المختزلة و ω تواتر اهتزاز كل من الهزازين ، أما طاقة الجملة E فتساوى ، عندما ينعدم التأثير بين الالكترونين ، ما يلى :

---

* سنختبر فيما بعد أن الكتلة المختزلة تساوى كتلة الالكترون ($m_{red} = m_0$) .

$$E = E_1 + E_2 = \hbar\omega (n_1 + n_2 + 1) \qquad (27.50)$$

وعندما لا توجد اثارة ($n_1 = n_2 = 0$) تكون الطاقة الصفرية

$$E_0 = m_0\omega^2 a^2 = \hbar\omega \qquad (27.51)$$

حيث a سعة الاهتزاز الصفرى ، ولنأخذ بعين الاعتبار التفاعل بين الهزازين ، ولنفرض الاحداثيات النظامية التالية :

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (y_1 + y_2), \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (y_1 - y_2)$$

وعندئذ تتحول المعادلة (27.49) إلى المعادلة ذات المتحولات المفصولة التالية :

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \alpha - (\beta^2 - \gamma) y_1^2 - (\beta^2 + \gamma) y_2^2 \right\} \psi (y_1, y_2) = 0 \qquad (27.52)$$

أما الطاقة الصفرية فتساوى عندئذ :

$$E_0' = \frac{1}{2} \hbar\omega \left(\sqrt{1 - \frac{\gamma}{\beta^2}} + \sqrt{1 + \frac{\gamma}{\beta^2}} \right) \qquad (27.53)$$

وبنشر العبارة الأخيرة فى سلسلة بالنسبة للمقدار الصغير :

$$\frac{\gamma}{\beta^2} = \frac{2e^2}{m_0\omega^2} \frac{1}{R^3} \qquad (27.54)$$

نجد أن الطاقة الصفرية للهزازين تتحول (دون اهمال التفاعل بين الهزازين) إلى الشكل التالى :

$$E_0' = \hbar\omega + V$$

حيث يعطى المقدار V بالعلاقة :

$$V = -\frac{1}{2}\hbar\omega\frac{e^4}{m_0^2\omega^4}\frac{1}{R^6} \qquad (27.55)$$

ويفسر هذا المقدار على أنه طاقة قوى فان ديروالس تملك طبيعة كوانتية لأنها تنعدم عندما $h \to 0$ ، وبحذف تواتر الاهتزاز بواسطة العلاقة (27.55) وبفرض أن سعة الاهتزاز تتناسب مع نصف قطر مدار بور الأول $a = \gamma\frac{\hbar^2}{m_0e^2} = \gamma a_0$ (γ هو معامل من رتبة الواحد) نجد للكمون V الصيغة التالية :

$$V = -\frac{\gamma^6}{2}\frac{e^2a_0^5}{R^6} \qquad (27.56)$$

هذا وقد تم الحصول على الصيغة (27.56) عن طريق الحسابات التى أجريت على تفاعل ذرتى الهيدروجين غير المتهيجتين بطريقة نظرية الاضطراب ، ووجد أن المعامل : $\frac{1}{2}\gamma^6 = 8$ ، وتتضاءل قوى فان ديروالس بسرعة كبيرة مع $R^{-7} \sim$ وليس بقانون أسى كما يحدث مع قوى التكافؤ ، وهذا يؤدى إلى الاستنتاج التالى : تلاحظ القوى بين الجزيئات لا على مسافات من ربتة قطر الجزىء بل على مسافات أكبر (خارج الجزىء) أيضا ، وهذه القوى تلعب دورا هاما عند استخراج معادلة فان ديروالس للحالة .

البند ٢٨ - بعض مسائل النظرية الكوانتية للجسم الصلب

يبدو أن تطبيق طرائق الميكانيكا الكوانتية مفيدة جدا لتفسير كثير من خواص الجسم الصلب ، تلك الخواص التى لا تفهم على أساس النظرية الكلاسيكية ، وكما فى كثير من الحالات فقد استطاعت الميكانيكا الكوانتية

أن تصف كيفيا وكميا أهم القوانين الناتجة عن الخواص البنيوية للجسم الصلب .

أ) حركة الالكترون فى حقل دورى . توابع بلوخ . من المعلوم أن أهم ما يميز الاجسام الصلبة هو تركيبها البلورى - بنية الشبكة ، أى توضع نوى الذرات الذى يمكن الحصول عليه بتكرار الخلية الابتدائية ، وبحكم هذه الخاصة (الازاحة اللامتغيرة) نستطيع حساب بنية الشبكة إذا علمنا بنية بلورة واحدة منها ، وفى الحقيقة إذا فرضنا متجه الشبكة :

$$n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3 \qquad (28.1)$$

حيث a_1, a_2, a_3 متجهات الوحدة اللامستوية الأساسية أما n_1, n_2, n_3 فهى أعداد صحيحة ، ويمكن القول أنلاتغير البلورة سيظهر عند ثبات بنيتها بالنسبة للانزياحات على المتجه $\underline{n}$ مهما كانت الأعداد الصحيحة n_i .

وتتحرك الكترونات الجسم الصلب فى الحقل الكهربائى للنوى الذرية وتتفاعل أيضا فيما بينها . ويبدو من بين الطرائق التقريبية المستخدمة لدراسة المسألة العامة المعقدة ، طريقة موفقة جدا وهى طريقة تقريب الالكترون الواحد ، وطبقا لهذه الطريقة يتم تغيير حركة كثير من الالكترونات بحركة الكترون واحد فى حقل كمون فعّال معين يأخذ بعين الاعتبار التفاعل بين الالكترونات الباقية بشكل جزئى ، بالاضافة إلى حقل النواة . وهكذا يجب أن يحقق التابع الموجى للمسألة وحيدة الالكترون ، معادلة شرودينجر الراسخة التالية :

$$\mathrm{H}\psi(r) = E\psi(r) \qquad (28.2)$$

حيث H الهاملتونيان التالى :

$$\mathrm{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V(r) \qquad (28.3)$$

الذى يحوى طاقة الكمون الفعّال $V(r)$ ، وبحكم ما نكرناه الآن يجب أن يكون للتابع $V(r)$ تناظر انزياحى أى أن يكون تابعا دوريا ، دوره يساوى دور الشبكة البلورية :

$$V(r+n)=V(r) \tag{28.4}$$

وسنفرض فيما بعد أن البلورة غير محدودة وهذا ما يؤمن استخدام الشروط الحدية الدورية ، ولنناقش الآن بعض الخواص العامة للتابع الموجى الناجمة عن البنية الدورية للشبكة ، فندرس أولا مؤثر الانزياح T_n الذى يتلخص تأثيره على التابع الموجى فى ازاحة الاحداثيات بمقدار دور الشبكة ، أى أن

$$T_n\psi(r)=\psi(r+n) \tag{28.5}$$

ومن الواضح ، وفقا لـ (28.4) ، أن المؤثر T_n يتبادل مع الهاملتونيان (28.3) ولهذا يمكن أن يكون لهما معا تابع خاص :

$$\begin{aligned}(H-E)\psi&=0\\(T_n-t_n)\psi&=0\end{aligned} \tag{28.6}$$

وأن طويلة القيم الخاصة للمؤثر T_n (أى t_n) الذى يحقق العلاقة

$$T_n\psi(r)=\psi(r+n)=t_n\psi(r) \tag{28.7}$$

ويجب أن تساوى الواحد لأن معايرة التابع الموجى لا يمكن أن تتعلق بانزياح مبدأ الاحداثيات ، ولنكتب هذه القيمة بالشكل التالى :

$$t_n=e^{ikn} \tag{28.8}$$

حيث k المتجه الموجى ، أما المقدار $\hbar k$ فيسمى شبه الاندفاع الذى سنتحدث عنه فيما بعد ، ولكننا نكتفى بالقول الآن أنه يساوى الاندفاع الحقيقى عندما تكون حركة الالكترون حرة $\hbar k$ $(V(r)=0)$. وسنميز

حالات الالكترون المختلفة بواسطة شبه الاندفاع $\hbar k$ وهى الحالات التى تحقق المعادلة التالية :

$$T_n \psi_{k,\lambda}(r) = \psi_{k,\lambda}(r+n) = e^{ikn}\psi_{k,\lambda}(r) \qquad (28.9)$$

حيث λ عدد كوانتى آخر (غير k) . ولننتقل الآن إلى صيغة أخرى للتابع الموجى (28.9) أسهل وأوضح من الناحية الفيزيائية فنكتبه بالشكل :

$$\psi_{k,\lambda}(r) = e^{ikr}U_{k,\lambda}(r) \qquad (28.10)$$

وتسمى التوابع (28.10) بتوابع بلوخ وهى تعبّر عن موجات مستوية معدلة وسعة التعديل فيها تتبع شكل الكمون الدورى $V(r)$ وشبه الاندفاع ، وأن الخاصية الجوهرية لهذه التوابع (أى $U_{k,\lambda}(r)$) هى دوريتها ، وفى الحقيقة إذا عدنا إلى المعادلة (28.9) وعوضنا فيها تابع بلوخ (28.10) نجد أن :

$$e^{ik(r+n)}U_{k,\lambda}(r+n) = e^{ikn}e^{ikr}U_{k,\lambda}(r) \qquad (28.11)$$

ومنه نجد أن للتابع $U_{k,\lambda}(r)$ الذى يميز سعة التعديل ، دورا يساوى دور الشبكة ، أى أن :

$$U_{k,\lambda}(r+n) = U_{k,\lambda}(r) \qquad (28.12)$$

وإذا بدلنا تابع بلوخ (28.10) فى معادلة شرودينجر الأصلية (28.2) نحصل على المعادلة التى يحققها تابع بلوخ ، أى أن :

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m_0}(\nabla + ik)^2 + E_\lambda(k) - V(r) \right\} U_{k,\lambda}(r) = 0 \qquad (28.13)$$

ويكفى حل هذه المعادلة فى مجال خلية ابتدائية واحدة ، لأن الشروط الحدية الدورية تكفل الاستمرار الدورى لهذه الحلول فى الخلايا المجاورة .

ب) **شبه الاندفاع** . يسمى المتجه $\hbar k$ ، الموجود فى تابع بلوخ (28.10) بشبه الاندفاع وهو يتحول إلى اندفاع حقيقى عند الانتقال إلى الحركة الحرة

للالكترون حيث $V(r)\to 0,$. وفى الحالة العامة لا تكون توابع بلوخ توابع خاصة لمؤثر الاندفاع $p=-i\hbar\nabla$ وبالتالى فإن $\hbar k$ لن تكون القيم الخاصة لهذا المؤثر ، واضافة إلى ذلك لا يكون شبه الاندفاع وحيد التعيين لأن تابع الطاقة الكامنة هو تابع دورى ، وفى الحقيقة يتعين المتجه k من العلاقة :

$$k'=k+G,\quad G=2\pi\tau \qquad (28.14)$$
$$\tau=m_1b_1+m_2b_2+m_3b_3$$

حيث m_i أعداد صحيحة ، أما τ فيسمى بمتجه مقلوب الشبكـة و b_i بالمتجهات الأساسية (القاعدية) المرتبطة مع المتجهات الأساسية للشبكة المباشرة بالعلاقة :

$$b_1=\frac{[a_2a_3]}{V_0},\quad b_2=\frac{[a_3a_1]}{V_0},\quad b_3=\frac{[a_1a_2]}{V_0} \qquad (28.15)$$

حيث $V_0=|(a_1[a_2a_3])|$ حجم الخلية الابتدائية ، وتنتج من التعريف السابق المساويات التالية :

$$a_ib_j=\delta_{ij} \qquad (28.16)$$

وإذا نشرنا المتجهتين n و τ بمتجهات القاعدة :

$$n=\sum_j n_ja_j,\quad \tau=\sum_i m_ib_i \qquad (28.17)$$

فإننا نحصل على العلاقة :

$$e^{ik'n}=e^{ikn}e^{iGn}=e^{ikn} \qquad (28.18)$$

ذلك لأن :

$$Gn=2\pi\tau n=2\pi\sum_{ij}m_in_jb_ia_j=2\pi\sum_{ij}m_in_j\delta_{ij}=2\pi\sum_i m_in_i \qquad (28.19)$$

ومجموع جداءات الأعداد الصحيحة يساوى عددا صحيحا دوما ، ولندرس

الآن الحالة $\psi_{k,\lambda}(r)$ ذات الطاقة $E(k)$ ، فطبقا لـ (28.14) ، يمكن أن نكتب :

$$\psi_{k,\lambda}(r)=e^{ikr}U_{k,\lambda}(r)=e^{i(k+G)r}U_{k+G,\lambda}(r) \qquad (28.20)$$

وهكذا يكون للتابع :

$$U_{k+G,\lambda}(r)=e^{-iGr}U_{k,\lambda}(r) \qquad (28.21)$$

نفس دور الشبكة المباشرة ، أى أن التابعين : $\psi_{k,\lambda}$ و $\psi_{k+G,\lambda}$ يقابلان نفس الحالة الطاقوية ، وبعبارة أخرى ، تكون القيم الخاصة لطاقة الالكترون الواقع فى حقل دورى ، دورية ودورها يساوى دور مقلوب الشبكة (الشبكة العكسية) :

$$E(k)=E(k+G) \qquad (28.22)$$

ولكى يتم حساب شبه الاندفاع بشكل وحيد التعيين نختار أصغر قيمة له k ، أى أننا نأخذ القيمة فى حدود الخلية الأساسية للشبكة العكسية والتى تضرب أبعادها الخطية بالمضروب 2π ، وتسمى هذه الخلية بمنطقة بريليون ، ولكى نوضح المعنى الفيزيائى لشبه الاندفاع ندرس حركة الالكترون فى حقل دورى تحت تأثير قوة خارجية F (حقل كهربائى خارجى مثلا) ، ومن الممكن أن نصف حركة جسيم متمركز عن طريق تشكيل الرزمة الموجية من تابع بلوخ فى مجال الأعداد الموجية $(k_0-\Delta k, k_0+\Delta k)$ ، أى أن :

$$\psi(r,t)=\int_{(\Delta k)} U_{k,\lambda}(r)\, e^{ikr-i\frac{Et}{\hbar}} d^3k; \quad E=E(k) \qquad (28.23)$$

ومن المعلوم ، انظر (1.48) ، أن مركز ثقل هذه الرزمة الموجية ينتقل بالسرعة التى تعطى بالعلاقة :

$$v=\frac{1}{\hbar}\,\mathrm{grad}_k E(k) \qquad (28.24)$$

وهذه السرعة تتطابق مع سرعة حركة الجسيم ، وفى الحقيقة إذا اخترنا مجال الأعداد الموجية Δk صغير جدا : $|\Delta k| \ll |k_0|$ فيمكن اعتبار السعة $U_{k,\lambda}(r)$ ثابتة عمليا فى هذا المجال وعندئذ يمكن الاستفادة من النتائج العامة لحركة الرزمة الموجية ، ومن جهة أخرى لا بد أن يغير عمل القوى الخارجية F من طاقة الجسيم وبصورة خاصة نجد أن :

$$\frac{dE(k)}{dt} = \text{grad}_k E(k) \frac{dk}{dt} = vF \qquad (28.25)$$

وبتبديل v بقيمتها من (28.24) نجد أن :

$$\frac{1}{\hbar} \text{grad}_k E(k) F = \text{grad}_k E(k) \frac{dk}{dt} \qquad (28.26)$$

ومنه ينتج أن :

$$F = \hbar \frac{dk}{dt} = \frac{d}{dt} \hbar k \qquad (28.27)$$

ومن الواضح أن هذه المعادلة تمثل قانون نيوتن الذى استبدل فيه الاندفاع بشبه الاندفاع ، وهى لا تبقى صحيحة للالكترون الحر وحده وإنما للالكترون المتحرك فى حقل دورى .

جـ) **البنية الشريطية لطيف الطاقة** . ان احدى الخواص الهامة لحركة الالكترون فى حقل دورى هى ما يسمى بالبنية الشريطية لطيف الطاقة ، ولبرهان ذلك نكتب معادلة شرودينجر فى أبسط حالة :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(r) - E_\lambda(k) \right\} \psi_{k,\lambda}(r) = 0 \qquad (28.28)$$

فنجد أن تابع بلوخ يؤول إلى موجة مستوية عادية عندما يكون الكمون $V(r)$ ثابتا ؛ حيث نجد فى هذه الحالة أن :

$$\psi_{k,\lambda}(r) = e^{ikr} U_{k,\lambda}(r) \rightarrow C e^{ikr} = \psi_k(r) \qquad (28.29)$$

لأن $U_{k,\lambda}(r) \to \text{const}$ أما طاقة الالكترون فترتبط مع الاندفاع $\hbar k$ بالعلاقة المميزة للحركة الحرة للجسيم بالمعادلة :

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \qquad (28.30)$$

ولا تكون الطاقة $E(k)$ فى الحالة العامة تابعا مستمرا للاندفاع ، أثناء حركة جسيم فى حقل دورى ، بل تنقسم إلى عدد من المناطق الطاقوية، أى أن الطاقة مستمرة فى مجالات عريضة حيث يتغير المقدار $\hbar k$ ولكنها تعانى بعض الانقطاعات عند قيم معينة لـ k ، وهكذا ينقسم الطيف الطاقوى إلى عدد من المناطق أو المواضع والتى تسمى بقيم الطاقة المسموحة ، وتنقسم بثغرات طاقوية تمثل المجالات الطاقوية الممنوعة* ، ولندرس بعض أمثلة حركة الالكترونات فى حقل دورى بهدف حساب طيف الطاقة .

د) **حالة الالكترونات الحرة تقريبا** . لكى نبسط المسألة سندرس حركة أحادية البعد لجسيم فى حقل كمونى $V(x)$ له دور الشبكة a :

$$V(x+a) = V(x) \qquad (28.31)$$

وعندئذ تأخذ معادلة شرودينجر (28.28) الشكل التالى :

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E(k)\right\}\psi_k(x) = 0 \qquad (28.32)$$

وسنفرض أن الحقل $V(x)$ ضعيف جدا لدرجة يمكن معها حساب تأثيره بواسطة نظرية الاضطراب ، وطبقا لهذه الفرضية (عندما لا يوجد اضطراب) ، فإن حل المعادلة (28.32) يعطى بموجة دوبرويل المستوية التالية :

$$\psi_k^0(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \qquad (28.33)$$

---

* تعتبر البنية الشريطية لطيوف الطاقة صفة مميزة لأى معادلة (تتعلق بحساب القيم الخاصة) وتبقى ثابتة بالنسبة لانزياح الشبكة .

حيث : $L = Na$ هو طول الناظم (العمود) الذى يساوى المجال الموافق لأبعاد البلورة ، وعندئذ تساوى طاقة الالكترون إلى :

$$E^0(k) \equiv \varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \qquad (28.34)$$

وكل طيف الطاقة سيكون مستمرا ، ولنطبق الآن طريقة نظرية الاضطراب فمن المعلوم أن التصحيح على التابع الموجى وعلى الطاقة يعطى بالعلاقتين ، انظر (8.22) و (8.33) ، التاليتين :

$$\begin{aligned} \psi_k(x) &= \psi_k^0(x) + \sum_{k' \neq k} \frac{V_{k'k}}{\varepsilon(k) - \varepsilon(k')} \psi_{k'}^0(x) \\ E(k) &= \varepsilon(k) + V_0 + \sum_{k' \neq k} \frac{|V_{k'k}|^2}{\varepsilon(k) - \varepsilon(k')} \end{aligned} \qquad (28.35)$$

حيث تساوى العناصر المصفوفية لمؤثر الطاقة الكامنة ما يلى :

$$V_{k'k} = \int \psi_{k'}^{0+} V \psi_k^0 \, dx = \frac{1}{L} \int_0^L e^{i(k-k')x} V(x) \, dx \qquad (28.36)$$

وهنا حسبنا التصحيح على الطاقة كتقريب من المرتبة الثانية فى نظرية الاضطراب ، ذلك لأن تصحيح التقريب الأول V_0 يساوى عنصر المصفوفة القطرى ($V_0 = V_{kk}$) ولا يتعلق بـ k وهو يؤدى إلى انزياح صغير على كل قيم الطاقة بمقدار ثابت ، سنهمل هذا التصحيح فيما بعد ونعتبر أن $V_0 = 0$ ، ونلاحظ بعدئذ أن الحدود غير القطرية فى عبارة العناصر المصفوفية (28.36) تحوى توابع دورية تحت إشارة التكامل ، ومن الواضح أن مثل هذه التكاملات تختلف عن الصفر عندما تكون للتوابع الأسية نفس دورية التابع $V(x)$ أى a ، وعندئذ يجب أن يتحقق الشرط :

$$e^{i(k-k')(x+a)} = e^{i(k-k')x}$$

أو

$$e^{i(k-k')a} = 1$$

وبعبارة أخرى فإن العناصر المصفوفية (28.36) لمؤثر الطاقة الكامنة تعطى نتيجة مغايرة للصفر فقط عندما :

$$k - k' = \frac{2\pi m}{a} = G, \quad m = \pm 1, \ \pm 2, \ldots \qquad (28.37)$$

ولنذكر بأن المتجه G يرتبط مع متجه مقلوب الشبكة بالعلاقة (28.15) ، فإذا أخذنا كل هذه الملاحظات بعين الاعتبار فإننا نستطيع كتابة الطاقة $E(k)$ فى (28.35) بالشكل التالى :

$$E(k) = \varepsilon(k) + \sum_{m \neq 0} \frac{\left| V_{k - \frac{2\pi m}{a}, k} \right|^2}{\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[k^2 - \left(k - \frac{2\pi m}{a}\right)^2\right]} \qquad (28.38)$$

وليس من الصعب أن نلاحظ وجود حدود فى المجموع تكبر بسرعة وهى تلك التى من أجلها يقترب المقام (مخرج الكسر) من الصفر ، فإذا تحققت العلاقة :

$$k^2 = \left(k - \frac{2\pi m}{a}\right)^2; \qquad k = \frac{\pi m}{a} = \frac{G}{2} \qquad (m = \pm 1, \ \pm 2, \ldots) \qquad (28.39)$$

فلا يمكن تطبيق نظرية الاضطراب التى اتبعناها فى هذا البند ، ولا تعتبر العلاقات التى حصلنا عليها صحيحة إلا بعيدا عن حدود مناطق بريليون * $k = \frac{\pi m}{a}$ ، وسنبرهن أن هذه الحدود هى النقط التى يتقطع فيها التابع $E(k)$ ، وللحصول على نتائج صحيحة بالقرب من نقط الانقطاع ، أى بالقرب من حدود بريليون نعود إلى فكرة تعددية التعيين لشبه الاندفاع (28.14) وعندئذ تبدو المسألة منطبقة فى التقريب الصفرى لأن للحالتين $\psi_k^0(x)$ و $\psi_{k-G}^0(x)$ الطاقة نفسها ، وهكذا نجد فى التقريب الصفرى أن :

$$E^0(k) = \varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad \psi_k^0(x) = A\psi_k(x) + B\psi_{k-G}(x) \qquad (28.40)$$

---

* يجب التفريق بين اصطلاحين ، الأول : مناطق بريليون التى تتعلق بالشبكة العكسية وهى تعرف فى حالة البعد الواحد بالعلاقة : $k = \frac{\pi m}{a}$ حيث تمتد المنطقة الأولى من $-\frac{\pi}{a}$ حتى $+\frac{\pi}{a}$ ، والثانى : المناطق الطاقوية ، أى مواضع الطاقة المسموحة والممنوعة .

حيث A و B معاملان اختياريان و$\psi_k(x)$ الأمواج المستوية التالية :

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \qquad (28.41)$$

وهذه المسألة منطبقة ثنائيا من أجل قيمة ثابتة لـ m ، وطبقا للأسس العامة لنظرية الاضطراب عندما يوجد انطباق ، انظر البند ٨ ، نحصل فى التقريب الأول على ما يلى :

$$E(k) = \varepsilon(k) \pm \sqrt{|V_{k,\,k-G}|^2} = \varepsilon(k) \pm \sqrt{\left|V_{\frac{\pi m}{a},\,-\frac{\pi m}{a}}\right|^2} \qquad (28.42)$$

وكذلك

$$A = \pm B \qquad (28.43)$$

ومنه ينتج أن الطاقة تعانى انقطاعا ΔE يعطى بالعلاقة :

$$\Delta E = 2\left|V_{\frac{\pi m}{a},\,-\frac{\pi m}{a}}\right| \qquad (28.44)$$

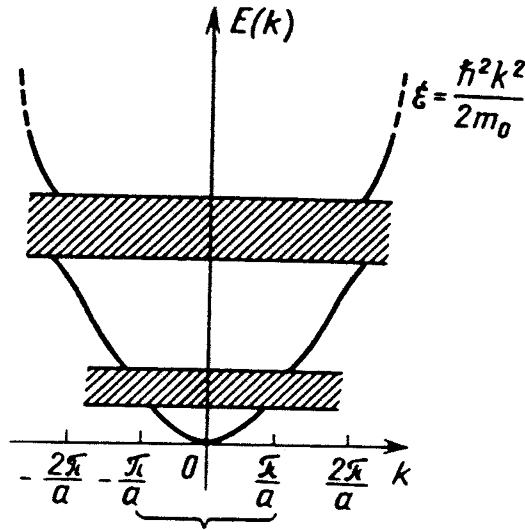
أما التابع الموجى فيساوى :

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2L}}\left(e^{\frac{i\pi m x}{a}} \mp e^{-\frac{i\pi m x}{a}}\right) \qquad (28.45)$$

ويوضح الرسم البيانى الشكل العام للتابع $E(k)$ فى حالة الالكترونات الحرة تقريبا (الشكل ٢٨ ـ ١) . ويبدو أن الطاقة ليست تابعا مستمرا لشبه الاندفاع $\hbar k$ ، وعوضا عن ذلك تتفكك الطاقة إلى مناطق وتعانى انقطاعا بجوار قيم معينة لـ k (على حدود مناطق بريليون) ، وتظهر فى الطيف الطاقوى مجالات القيم الطاقوية المحظورة (الثغرات الطاقوية) ، هذا ويبقى التابع $E(k)$ مستقرا فى مجالات القيم المسموحة للطاقة (ونلاحظ أن ظهور المناطق الطاقوية ناتج عن البنية الدورية للبلورة * وهو يعكس

---

* نلاحظ أن العلاقتين الموضعيتين الهامتين : $k' - k = G$ و $k'^2 = k^2$ تصادفان أيضا فى نظرية انعراج أشعة رونتجن على البلورات وهذا ما يسمى بمعادلة لاوى ، ويشير ذلك إلى العلاقة الوطيدة بين ظهور مناطق الطاقة والخواص الموجية للالكترونات .



الشكل ٢٨ ـ ١ . علاقة الطاقة من أجل حالة الالكترونات الحرة تقريبا ، حيث يرمز القسم المخطط على مجالات الطاقة الممنوعة .

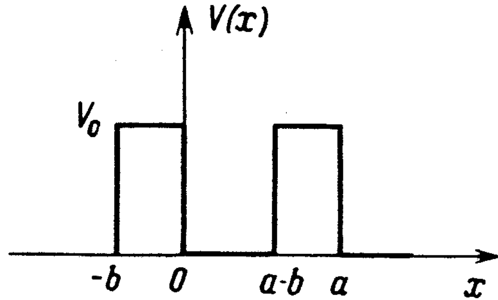
السمات الأساسية الخاصة بالبنية الالكترونية للجسم الصلب) . ويعتبر حساب المناطق الطاقوية فى كل حالة مسألة معقدة وصعبة ، وسنقتصر على مثال واحد وهو ما يسمى بمسألة كرونيغ وبينى .

هـ) مسألة كرونيغ و بينى . لقد درس كرونيغ وبينى أحد أبسط أمثلة الحقل الدورى أحادى البعد عام ١٩٣١ ، ويبدو أن لهذا المثال حلا دقيقا ، كما أنه يستدعى الاهتمام بالرغم من قربه من نموذج البلورة لأنه يوضح طبيعة ظهور البنية الشريطية للطيف الطاقوى . ولندرس حركة الالكترون فى حقل دورى أحادى البعد موضح على الشكل ٢٨ ـ ٢ ، ولنختر حلا لمعادلة شرودينجر (فى المنطقة التى ينعدم فيها الكمون) بالشكل التالى :

$$\psi_1(x) = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}, \quad \alpha = \frac{\sqrt{2m_0E}}{\hbar} \qquad (28.46)$$

أما فى منطقة الحاجز فنختار الحل بالشكل التالى :

$$\psi_2(x) = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x}, \quad \beta = \frac{\sqrt{2m_0(V_0 - E)}}{h} \qquad (28.47)$$



الشكل ٢٨ ـ ٢ . كمون كرونيغ ـ بينى .

ولنكتب شروط دمج التابع الموجي ومشتقاته على الحدود $-b , 0 , a - b$ بالشكل :

$$\psi_2(0) = \psi_1(0), \quad \psi_2'(0) = \psi_1'(0) \qquad (28.48)$$

وكذلك :

$$\begin{aligned} \psi_2(-b) &= e^{-i\lambda a}\psi_1(a-b) \\ \psi_2'(-b) &= e^{-i\lambda a}\psi_1'(a-b) \end{aligned} \qquad (28.49)$$

حيث λ مقدار حقيقى ، ولقد استفدنا فى العلاقات الأخيرة من الخواص العامة للتوابع الموجية ، للالكترون فى الحقل الدورى ، التى تخضع لقانون الانزياح :

$$\psi(x+a) = e^{ika}\psi(x)$$

نعوض حل معادلة شرودينجر (28.46) و (28.47) فى شروط الوصل (الاندماج) (28.48) و (28.49) فنحصل A, B, C, D, λ على المعادلات التالية :

$$\begin{aligned} C + D &= A + B \\ C - D &= i\frac{\alpha}{\beta}(A - B) \\ Ce^{-\beta b} + De^{\beta b} &= e^{-i\lambda a}[Ae^{i\alpha(a-b)} + Be^{-i\alpha(a-b)}] \\ Ce^{-\beta b} - De^{\beta b} &= \frac{i\alpha}{\beta}e^{-i\lambda a}[Ae^{i\alpha(a-b)} - Be^{-i\alpha(a-b)}] \end{aligned} \qquad (28.50)$$

وليس من الصعب الحصول من المعادلات السابقة على المعادلات التالية :

$$(A+B)\left[\operatorname{ch}\beta b-e^{-i\lambda a}\cos\alpha(a-b)\right]=$$
$$=i(A-B)\left[\frac{\alpha}{\beta}\operatorname{sh}\beta b+e^{-i\lambda a}\sin\alpha(a-b)\right]$$
$$(A+B)\left[\operatorname{sh}\beta b-\frac{\alpha}{\beta}e^{-i\lambda a}\sin\alpha(a-b)\right]=$$
$$=i(A-B)\left[\frac{\alpha}{\beta}\operatorname{ch}\beta b-\frac{\alpha}{\beta}e^{-i\lambda a}\cos\alpha(a-b)\right] \qquad (28.51)$$

وتكون هذه المعادلات متوافقة (لها حل غير الصفر) إذا انعدم معين الأمثال ، ومنه نجد أن :

$$\cos\lambda a=\frac{\beta^2-\alpha^2}{2\alpha\beta}\operatorname{sh}\beta b\sin\alpha(a-b)+\operatorname{ch}\beta b\cos\alpha(a-b) \qquad (28.52)$$

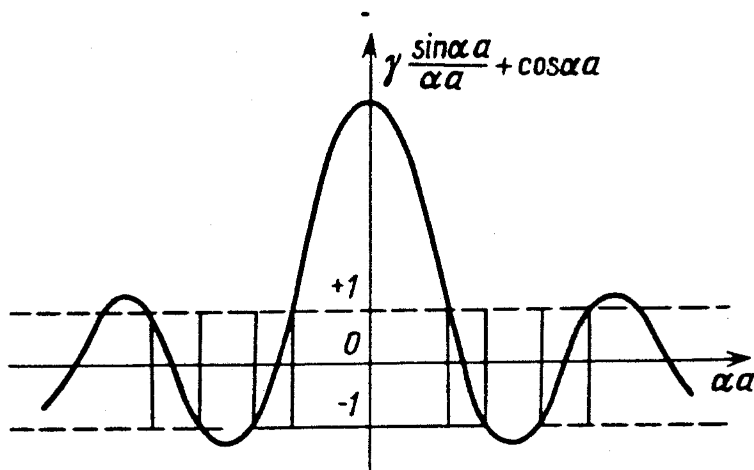
وعليه يمكن حساب طيف الطاقة بطريقة بيانية إذا اعتبرنا أن الطرف الأيمن للمساواة السابقة لا يمكن أن يتجاوز الواحد ، ولكى نبسط المسألة ونوضح حلها نقرب تابع الكمون (الشكل ٢٨ ـ ٢) إلى التابع δ وذلك بفرض أنه عندما $b-0$ فإن V_0 تنتهى إلى اللانهاية ($V_0-\infty$) وعندئذ يتناسب المقدار :

$$\frac{m_0V_0}{\hbar^2}ab=\gamma \qquad (28.53)$$

مع المساحة المحصورة ضمن الحاجز والتى تبقى محدودة ، وعندئذ إذا لاحظنا أن : $\operatorname{sh}\beta b\simeq b\beta,\ \operatorname{ch}\beta b\simeq 1$ نجد عوضا عن (28.52) العلاقة التالية :

$$\cos\lambda a=\gamma\frac{\sin\alpha a}{\alpha a}+\cos\alpha a \qquad (28.54)$$

وبما أن λ قيمة حقيقية فإن هذه المعادلة تتحقق عندما يتغير طرفها الأيمن من -1 إلى $+1$ (انظر الشكل ٢٨ ـ ٣) . وهكذا نرى فى هذا المثال أن الطيف الطاقوى يظهر البنية الشريطية التى تتألف من مواضع متتالية من



الشكل ٢٨ ـ ٣ . الخط البيانى لقيم الطاقة المسموحة وفق نموذج كرونيغ ـ بينى ، حيث يشير الخط الغامق إلى قيم الطاقة المسموحة .

قيم الطاقة المسموحة والممنوعة ، وتتضح من الحالتين الخاصتين المذكورتين سابقا والمتعلقتين بحركة الالكترون فى حقل دورى الخواص العامة المميزة لطيف الطاقة : مناطق متعاقبة (أو شرائط) للطاقات المسموحة أو المحظورة ، وتبقى هذه النتيجة صحيحة فى الحالة العامة ، مهما كانت نماذج الحقل الدورى ، ولكن بنية مناطق الطاقة يمكن أن تكون أكثر تعقيدا وخاصة مناطق القيم المسموحة التى قد تتقاطع أحيانا ، والجدير بالذكر أن حساب المناطق السابقة لبعض البلورات مسألة معقدة ومرهقة .

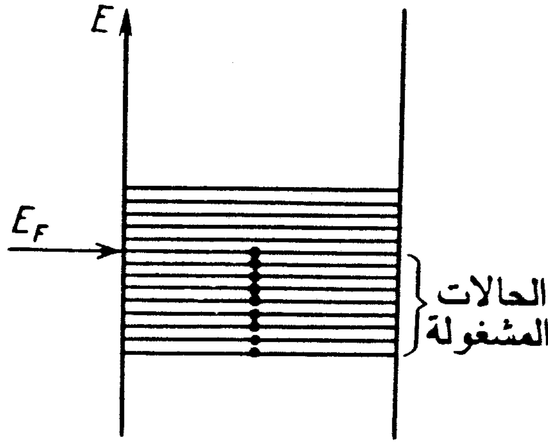
وسندرس الآن بعض المسائل العامة المتعلقةبتطبيقات الميكانيكا الكوانتية على حركة الالكترونات فى البلورة ، وبغض النظر عن الحالة المثالية التى فرضناها عند حل هذه المسألة ، فإن للنتائج التى تتعلق ببنية الطيف الطاقوى أهمية كبيرة فى فيزياء الجسم الصلب ولعل أهم الانجازات الجوهرية للنظرية الكوانتية للجسم الصلب هو تفسير مجموعة القوانين المتعلقة بدراسة الناقلية (الموصلية) الكهربائية للأجسام الصلبة .

و) الناقلية (الموصلية) الكهربائية للأجسام الصلبة من وجهة نظر البنية الموضعية لطيف الطاقة . سنحاول انطلاقا من البنية الموضعية لطيف طاقة الاجسام الصلبة تصنيف خواص الناقلية الكهربائية لهذه الأجسام تبعا لخاصة انشغال مناطقها المذكورة سابقا بالالكترونات ، وسنفترض فى دراسة الذرات أن الالكترونات فى الوضع العادى للجسم الصلب « تتوق » إلى تعبئة الحالات الطاقوية الأكثر انخفاضا ، ونذكر أنه فى درجة الصفر المطلق ، انظر (5.78) ، تملؤ الالكترونات كل السويات الطاقوية حتى أعلى سوية (سوية فيرمى) ، وهكذا تمتلىء جميع السويات فى الحالة الأساسية للبلورة داخل سطح معين فى فراغ المتجهات الموجبة (الاندفاعات) ، وكل السويات خارج هذا السطح ستكون فارغة فيما يسمى هذا السطح بسطح فيرمى أما الطاقة المقابلة E_F المقاسة من قاع المنطقة فتسمى بطاقة فيرمى ، ونلاحظ أنه فى حالة الالكترونات الحرة تقريبا والتى تتعلق طاقتها بالاندفاع بشكل تربيعى ، انظر (28.40) ، حيث يكون سطح فيرمى عبارة عن كرة $\hbar^2k^2 \leqslant 2m_0E_F$ (كرة فيرمى) ، كما تسمح بنية مناطق طاقة الجسم الصلب وطبيعة امتلائها (وضع سوية فيرمى) بتقسيم الأجسام الصلبة حسب طبيعة ناقليتها .

١ ـ النواقل (الموصلات) . إن الصفة المميزة للنواقل (المعادن) هى وجود مناطق طاقة مسموحة تكون مملوءة جزئيا فى الحالة الأساسية ، انظر الشكل* ٢٨ ـ ٤ ، وفى الحقيقة يمكن التصور أن الالكترونات فى الجسم الصلب تنقسم إلى أزواج ، يتحرك كل الكترونين منها بسرعة واحدة ولكن باتجاهين مختلفين ، وعندئذ ينعدم متوسط التيارات التى تجرى فى اتجاهين
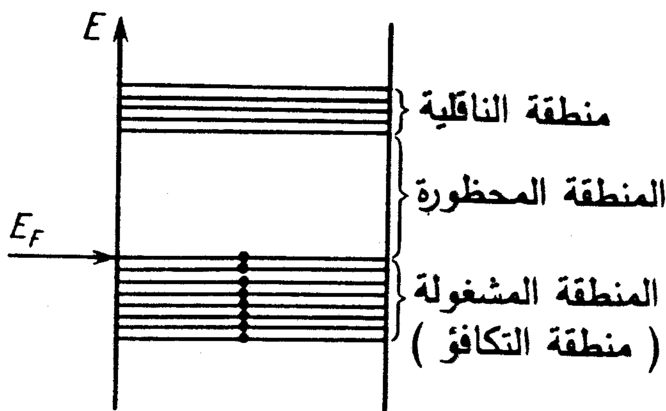
---

* بما أن للالكترونات مغزلا يساوى $\frac{1}{2}$ (انظر البند ١٦) فطبقا لمبدأ باولى (انظر البند ٢٤) ، يمكن أن يوجد فى كل حالة من الحالات المرسومة على الشكل ٢٨ ـ ٤ الكترونان يختلفان عن بعضهما بمسقط المغزل .



الشكل ٢٨ ـ ٤ . منطقة الطاقة المملوءة جزئيا الخاصة بالمعادن .

مختلفين لأنها تتعادل مثنى مثنى ، وفى هذا الوضع (عندما تكون المناطق مملوءة جزئيا) من السهل الاخلال بالتوازن الاحصائى وذلك بتطبيق حقل كهربائى ضعيف يسبب انتقال الالكترونات إلى أقرب سوية فارغة ، وعندئذ- يختلف متوسط الالكترونات عن الصفر ويظهر التيار ، وبما أن سويات الطاقة بالقرب من حدود فيرمى تتوضع قريبة من بعضها فيمكن أن يظهر تيار حتى ولو كان الحقل ضعيفا جدا ، وأن مخطط امتلاء السويات الطاقوية هذا خاص بالمعادن فقط ، ويتغير هذا الوضع إذا كانت المنطقة الرئيسية التى تقع فوقها الثغرة الطاقوية مملوءة تماما .

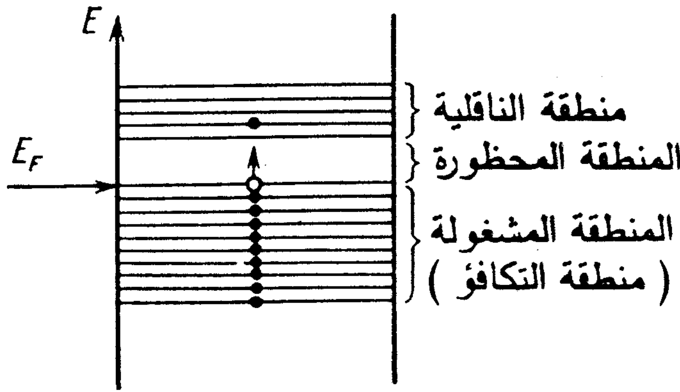
٢ ـ العوازل . إذا كانت المنطقة الرئيسية (منطقة التكافؤ) فى الجسم الصلب مملوءة تماما والحالات الفارغة اللاحقة مفصولة عنها بثغرة طاقوية (مناطق الطاقة المحظورة) (انظر الشكل ٢٨ ـ ٥) فإننا نكون بحاجة إلى تيار قوى وإلى صرف مقدار كبير من الطاقة لكى تتم إثارة التيار واجتياز الثغرة ، ولهذا يكون الجسم الصلب فى هذه الحالة عازلا بالرغم من أن الالكترونات تتحرك فى الشبكة البلورية ، وإن مثل هذا الأمر ، أى وجود



الشكل ٢٨ ـ ٥ . امتلاء مناطق الطاقة الخاصة بالعوازل .

مناطق فارغة أكثر ارتفاعا فى الحالة الأساسية هو خاصة مميزة أيضا لأنصاف النواقل.والعوازل هى أنصاف نواقل ثغراتها الطاقوية ذات أبعاد كبيرة ، وفى الواقع أن جميع الأجسام (النقية) التى تمتلىء مناطقها الطاقوية ، تكون عازلة فى درجة الصفر المطلق ، وبما أن أبعاد المنطقة المحظورة (الثغرة الطاقوية) مختلفة فلا بد أن يظهر اختلاف فى خواص ناقليتها عند ارتفاع درجة الحرارة . وإن الثغرة الطاقوية للماس كبيرة نسبيا (6-7 eV) ولهذا لا يبقى الماس عازلا فى درجة الصفر المطلق وحدها وإنما فى درجة حرارة الغرفة أيضا ، أما فى الجرمانيوم فتكون المنطقتان المملوءة والفارغة قريبتين من بعضهما (0,72 eV) ولهذا نلاحظ أنه فى درجة حرارة الغرفة ، وكنتيجة للتقلبات الحرارية ، ينتقل عدد كبير من الالكترونات ليترامى فى منطقة الناقلية الفارغة ، وهكذا تصبح بلورة الجرمانيوم ناقلة ، لذا فأنصاف النواقل هى عبارة عن أجسام صلبة ناقليتها معدومة عندما $T = 0$ ولكنها تزداد بشكل ملحوظ عند ارتفاع درجة الحرارة ، ولندرس الآن بشكل مفصل ناقلية أنصاف النواقل .

١ ـ الناقلية الذاتية . نلاحظ أن الالكترون ينتقل عند اثارته من منطقة منخفضة ويمر بثغرة طاقوية إلى منطقة أعلى (انظر الشكل ٢٨ ـ ٦)



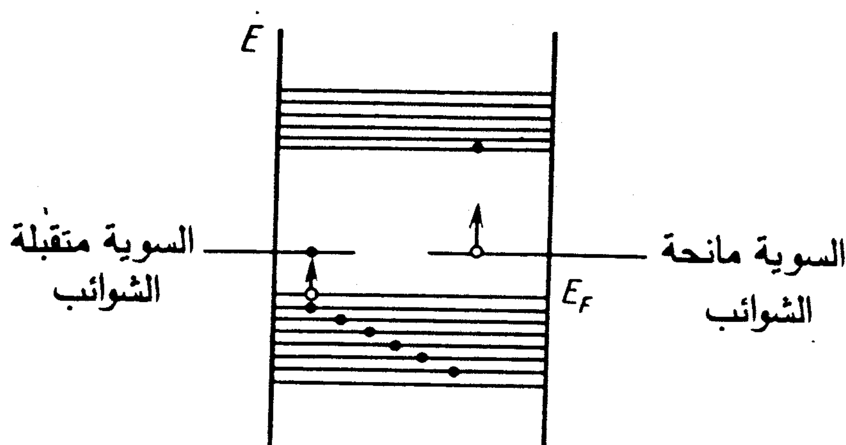
الشكل ٢٨ ـ ٦ . مخطط الناقلية الالكترونية والثغروية (الثقبية) فى نصف (شبه) ناقل .

وبنفس الوقت يتشكل مكان فارغ « ثقب » أو « فجوة » فى المنطقة المملوءة ، ويبدو أنه يمكن تفسير حركة « الثقب » كالجسم المشحون إيجابيا (هايزنبرغ ١٩٣١) ، وهكذا يمكن دراسة ناقلية نصف الناقل النقى (الناقلية الذاتية) كأنها حركة الكترونات فى المنطقة الأعلى (الناقلية الالكترونية) وحركة ثقوب فى المنطقة المملوءة تقريبا (ناقلية الثقوب)* .

٢ ـ ناقلية الشوائب . لقد تكلمنا حتى الآن عن النواقل النقية ، ولكن يجب ملاحظة أن إدخال أى شوائب إلى بلورة نصف الناقل يمكن أن يؤدى إلى تغيير جوهرى فى ناقليتها ، فمثلا إدخال ذرة واحدة من عنصر البورون إلى 10^5 ذرة يضاعف الناقلية الأصلية بمقدار ١٠٠٠ مرة ، وتستطيع ذرات الشوائب أن تعطى الكتروناتها إلى المنطقة الفارغة فى البلورة وعندئذ تسمى الشوائب بالمانحة لأنها تشارك فى عملية الناقلية ولأن الكتروناتها تتحرك فى منطقة الناقلية غير المملوءة ، وتسمى هذه الالكترونات بالكترونات الناقلية فيما تسمى أنصاف النواقل المعالجة بالموانح بأنصاف نواقل من النموذج n . وتستطيع فى بعض الأحيان ذرات الشوائب أن تأسر

* يتشابه كثيرا هذا التفسير مع طروحات ديراك ، انظر البند ٢٢ .

الكترونات طبقة منخفضة مملوءة فى البلورة وتسمى عندئذ بشوائب آخذة حيث يتشكل فى المنطقة المملوءة تقريبا ، ثقب يمكن اعتبار حركته كحركة جسيم موجب ، ولأنصاف النواقل المعالجة بالآخذات ناقلية الثقوب وتسمى بأنصاف نواقل من النموذج - p ، (الشكل ٢٨ ـ ٧) . وتفسر هذه النتائج



الشكل ٢٨ ـ ٧ . مخطط ناقلية الشوائب فى نصف ناقل .

الأساسية لنظرية شرائط طيف الطاقة ناقلية الأجسام الصلبة ، وقد درسنا هنا البلورات المثالية فقط وأن أى خلل يمكن أن يؤدى إلى تأثير جوهرى على الناقلية الكهربائية ، لكن هذه المسائل المختلفة تخرج عن إطار بحثنا . ونلاحظ أن النظرية الشريطـية لطيف طاقة الأجسام الصلبة هى نموذج تقريبى وتسمح نتائجها والتى حصلنا عليها بوصف كثير من خواص الجسم الصلب الهامة بطريقة بسيطة وواضحة ، ولكن هذا الوصف لا يعتبر تاما لأن المنطلقات الأساسية له هى عبارة عن مجرد افتراضات .

ز) **حركة الكترون فى منطقة الناقلية . الكتلة الفعالة** . لندرس الآن حركة الالكترونات فى منطقة الناقلية ، ولنعرف مفهوم الكتلة الفعالة أولا : إن للطاقة الكامنة والطاقة الحركية أثناء حركة الالكترونات فى البلورة شكلا

معقدا جدا وبالتالى لا يمكن التعبير عن الطاقة الكلية للجسيم بشكل بسيط كما فعلنا عندما كانت الحركة حرة ، ولندرس توخيا للتبسيط بلورة أحادية البعد ولننشر الطاقة $E(k)$ بسلسلة تايلور بجوار النقطة k_0 ، أى أن :

$$E(k) = E(k_0) + (k - k_0)\frac{\partial E(k_0)}{\partial k_0} + \frac{1}{2}(k - k_0)^2 \frac{\partial^2 E}{\partial k_0^2} + \cdots \qquad (28.55)$$

ثم نختار النقطة k_0 بحيث تتوافق نهاية التابع $E(k)$ فنكتب :

$$E(k) = E(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m^*}(k - k_0)^2 + \ldots \qquad (28.56)$$

وتعطى الكتلة الفعالة m^* عندئذ بالشكل التالى :

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k_0^2}\,* \qquad (28.57)$$

وهذا يعنى أن الالكترون ضمن هذا التقريب (تقريب بلوخ) ، يتحرك داخل شرائط بحيث تكون الطاقة مسموحة كجسيم كتلته الفعالة معرفة بالعلاقة (28.57) ومن السهل ملاحظة اختلاف الكتلة الفعالة للالكترون عن كتلته الحقيقية ، وهذا الاختلاف يتعلق بالقيمة المطلقة وبالاشارة . وفى الحقيقة ، لنفرض أن الالكترون يتحرك فى منطقة الناقلية التى تحوى عددا غير كبير من الجسيمات ، وعندئذ يقع الالكترون فى حالات قريبة من قاع المنطقة أى بجوار النهاية الصغرى للطاقة ولهذا تكون k_0 نقطة النهاية الصغرى للتابع $E(k)$ و $\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} > 0$ ، وبالتالى تتميز الناقلية الالكترونية فى هذه الحالة بكتلة فعالة موجبة ، وعلى العكس من ذلك إذا وجد عدد كبير من الالكترونات فى المنطقة الطاقوية (المنطقة المملوءة تقريبا) فإن k_0

* تؤول هذه العلاقة فى حال البلورة ثلاثية الأبعاد إلى رتل (تنزور) الكتلة الفعالة

$$m^*_{ij} = \hbar^2 \Big/ \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$$

يقابل نهاية عظمى للطاقة ، ومن الواضح عندئذ أن $\partial^2 E / \partial k^2 < 0$ وبالتالى تكون الكتلة الفعالة سالبة ، والالكترون يسلك سلوك جسيم كتلته الفعالة سالبة : $m^* < 0$ ٠ من المستحسن كما ذكرنا سابقا فى المناطق الطاقوية المملوءة تقريبا بالالكترونات أن لا نحسب الحالات المشغولة وإنما الفارغة أى الثقوب وأن عدم وجود الالكترون فى المنطقة المملوءة مكافىء لظهور جسيم مشحون إيجابيا كتلته الفعالة $m^*_{hole} = -m > 0$ ولهذا تقابل حركة الالكترونات ذات الكتلة الفعالة السالبة ما يسمى بناقلية الثقوب ، وليس من الصعب تفسير ذلك بواسطة العلاقة-التى تشبه قانون نيوتن فى الميكانيكا الكلاسيكية ، إذ يمكن الحصول من العلاقة التى تعطى سرعة الالكترون (28.24) والعلاقة التى تعطى شبه الاندفاع على ما يلى :

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}\frac{\partial E}{\partial k} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\frac{d\hbar k}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}F = \frac{1}{m^*}F \quad (28.58)$$

حيث m^* الكتلة الفعالة ، وإذا تحدثنا الآن عن حركة الالكترون تحت تأثير قوى كهرطيسية فإن F هى قوة لورنتز التالية :

$$F = -e_0\mathscr{E} - \frac{e_0}{c}[v\mathscr{H}] \quad (28.59)$$

وينتج عندئذ من (28.58) أن الالكترون ذا الكتلة الفعالة السالبة مكافىء لجسيم شحنته موجبة وكتلته الفعالة موجبة * .

ولقد ذكرنا سابقا أنه عندما يرمى الكترون العوازل فى منطقة الناقلية فسيبقى مكانه فارغا (ثقب) فى المنطقة المنخفضة ، وقد تم التحقق من أن لهذا الثقب شحنة موجبة ، وهكذا لابد أن يتعرض الالكترون لتفاعل مع الثقب المشحون إيجابيا ، ومن الممكن أن نتصور جملة مؤلفة من الكترون وثقب يدوران بالنسبة لبعضهما وتسمى هذه الجملة المرتبطة إكسيتون .

---

* قارن مع خلفية ديراك .

ج) اهتزاز الشبكة البلورية (الفونونات) . لقد درسنا فى بداية هذا البند حركة الالكترون فى حقل دورى وتعتبر هذه المسألة من المسائل الأساسية فى نظرية الجسم الصلب لأن البنية الشبكية لجسم ما تميزه عن غيره من الأجسام وتحدد كثيرا من خواصه الهامة ، وقد استندت النتائج العامة للنظرية على فرضية ثبات الذرات (الأيونات) المشكلة للشبكة ولكن هذه الفرضية فى الحقيقة ، تخيلية لأن ذرات (أيونات) البلورة تتعرض للاهتزاز فعلا ويبدو أن هذه الاهتزازات هامة جدا لأنها تحدد الخواص الفيزيائية للأجسام الصلبة كالسعة الحرارية والمقاومة وغيرها ، ولندرس حركة الشبكة بالتفصيل ولهذا نفرض أن الذرات تقوم باهتزاز توافقى حول وضع توازنها فى عقد البلورة ، أما الوصف التفصيلى لحركة الذرات فهو صعب جدا لأنه يتطلب معرفة خواص بنية البلورة المدروسة ، بينما يسهل وصف الاهتزاز الصوتى للجسم الصلب ويمثل (أمواج صوتية) تنتشر فى الجسم الصلب دون الاهتمام بحركة كل ذرة بمفردها ، وسنفترض منذ البداية توخيا للتبسيط إمكانية حدوث اهتزاز أحادى البعد وأنه توجد فى كل خلية ذرة واحدة ، أما وضع الخلية فيميز بالمتجه (28.1) ، أى أن :

$$\boldsymbol{n} = n_1 \boldsymbol{a}_1 + n_2 \boldsymbol{a}_2 + n_3 \boldsymbol{a}_3 \qquad (28.60)$$

حيث a_i هى متجهات القاعدة للشبكة و n_i أعداد صحيحة ، ولنرمز بـ X_n لانزياح الذرة عن وضع توازنها فى الخلية n ، وعندئذ يمكن كتابة طاقة اهتزازات الشبكة بالشكل التالى :

$$H = \sum_n \frac{M}{2} \dot{X}_n^2 + \frac{1}{2} \sum_n \sum_m C_m X_n X_{n+m} \qquad (28.61)$$

حيث M كتلة الذرة و C_m معامل يحقق الشرط التالى :

$$C_m = C_{-m} \qquad (28.62)$$

ويمثل الحد الثانى فى الجمع (28.61) الطاقة الكامنة لتفاعل الذرات فيما بينها ، أما شكله الصريح وكذلك الشرط (28.62) الموضوع على المعامل C_m فيتعينان إذا فرضنا أن قوى التفاعل بين الذرات لا تتبع إلا للمسافة النسبية بين الخليتين الحاويتين للذرتين ، أما المعادلة الكلاسيكية لحركة الخلية n المقابلة للطاقة (28.61) ، وباعتبار تحقق الشرط (28.62) ، فنحصل عليها بالشكل :

$$M\ddot{X}_n = -\sum_m C_m X_{n+m} \qquad (28.63)$$

وأما حل المعادلة الأخيرة فنفرضه بشكل نشر فورييه :

$$X_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q (X_q e^{iqn} + X_q^* e^{-iqn}) \qquad (28.64)$$

حيث N عدد الخلايا فى البلورة أما الجمع فيقتصر على المتجهات الموجية q الواقعة ضمن المجال : $-\pi \leqslant qa_i \leqslant \pi \ \ (i = 1,\ 2,\ 3)$ ، أى فى حدود خلايا الشبكة العكسية ، وأما معاملات النشر X_q فيجب أن تتبع الزمن حسب العلاقة :

$$X_q(t) = X_q^0 e^{-i\omega_q t} \qquad (28.65)$$

وعندئذ نحصل لحساب التواترات ω_q على المعادلة التالية :

$$M\omega_q^2 = \sum_m C_m e^{iqm} \qquad (28.66)$$

وإذا رمزنا لحاصل تحويل فورييه للمعاملات C_m بالرمز C_q

$$C_q = \sum_m C_m e^{iqm} \qquad (28.67)$$

فإننا سنجد التواترات الخاصة بالاهتزاز ، أى أن : $\omega^2_q = C_q / M$ ولنحول الآن عبارة الطاقة (28.61) بواسطة النشر (28.64) والمساواة (28.65) وهكذا نحصل على الطاقة الحركية التالية :

$$\sum_n \frac{1}{2} M\dot{X}_n^2 = \sum_q \frac{1}{2} M\omega_q^2 (X_q X_q^* + X_q^* X_q - X_q X_{-q} - X_q^* X_{-q}^*) \quad (28.68)$$

مع العلم أننا استخدمنا العلاقة :

$$\sum_n e^{i(q+q')n} = N\delta_{q,-q'}$$

حيث : $\delta_{q,-q'} = \delta_{q_x,-q'_x}\delta_{q_y,-q'_y}\delta_{q_z,-q'_z}$ رمز كرونيكر ثلاثى الأبعاد ، وبصورة مشابهة نجد لحساب الطاقة الكامنة العبارة التالية :

$$\frac{1}{2}\sum_n \sum_m C_m X_n X_{n+m} =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_m \sum_q C_m (X_q X_q^* e^{-iqm} + X_q^* X_q e^{iqm} + X_q X_{-q} e^{-iqm} + X_q^* X_{-q}^* e^{iqm}) \quad (28.69)$$

ثم إذا استفدنا من معادلة تواترات الاهتزاز (28.66) فإنه يمكن كتابة الطاقة الكامنة فى نفس الشكل الذى حصلنا عليه للطاقة الحركية ، لكن الاشارة قبل الحدين الأخيرين ستكون موجبة طبقا لـ (28.69) وبالجمع نجد طاقة الاهتزاز التالية :

$$H = \sum_q (X_q X_q^* + X_q^* X_q) M\omega_q^2$$

ولننتقل الآن إلى تكميم اهتزاز البلورة ولهذا لا بد من تحويل الانزياحات الكلاسيكية : X_q و X_q^* إلى مؤثرات X_q و X_q^+ (انظر تكميم الحقل الكهرطيسى) فنكتب المعادلة الكوانتية للحركة (28.65) دون اهمال تابعية X_q لـ t بالشكل :

$$\frac{dX_q}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, X_q] = -i\omega_q X_q$$

وتتحقق هذه المعادلة عندما يحقق المؤثران : X_q و X_q^+ العلاقات التبادلية التالية :

$$[X_q, X_{q'}^+] = \frac{\hbar}{M\omega_q}\delta_{q',q}$$

$$[X_q, X_{q'}] = [X_q^+, X_{q'}^+] = 0$$

ونستبدل المؤثرين X_q و X_q^+ بالمؤثرين* :

$$a_q = \sqrt{\frac{M\omega_q}{\hbar}}\, X_q, \quad a_q^+ = \sqrt{\frac{M\omega_q}{\hbar}}\, X_q^+ \qquad (28.70)$$

اللذين يحققان العلاقة :

$$[a_q, a_{q'}^+] = \delta_{q,q'} \qquad (28.71)$$

مع ملاحظة أن نفس هذه العلاقات التبادلية يحققها المؤثران اللذان فرضناهما سابقا (انظر البند ٧) عند دراسة الهزاز التوافقى ، وباستخدام المؤثرين a_q و a_q^+ يمكن كتابة هاملتونيان الجملة مع تحقق الشرط (28.71) بالشكل :

$$H = \sum_q \hbar\omega_q (a_q^+ a_q + {}^1\!/_2) \qquad (28.72)$$

وقد برهنا فى البند ٧ أن التركيب التربيعى $a_q^+ a_q$ هو عبارة عن مؤثر نظرى قيمه الخاصة أعداد صحيحة ... $n = 0, 1, 2,$ ولهذا تكون طاقة الجملة أى القيم الخاصة للهاملتونيان (28.72) تساوى :

$$E = \sum_q (n_q + {}^1\!/_2)\, \hbar\omega_q . \qquad (28.73)$$

وتفسر هذه العبارة بالشكل التالى : تفهم الأعداد الصحيحة n_q الواقعة مباشرة بعد اشارة المجموع كأنها عدد الاضطرابات الأولية وأشباه الجسيمات التى لكل منها طاقة $\hbar\omega_q$ قد أطلق عليها اسم فونونات وهى تقابل الاهتزاز الصوتى للبلورة ، أما المجموع بكل قيم q فيمثل الطاقة الاهتزازية للبلورة باعتباره الطاقة الكلية للفونونات الموجودة فى حالات ذات طاقة $\hbar\omega_q$ وشبه الاندفاع $\hbar q$** ، ويمكن فهم المؤثر a_q^+ الذى ينحصر فى زيادة n_q بواحد $(n_q \to n_q + 1)$ (البند ٧) كأنه مؤثر خلق الفونونات أما المؤثر a_q

---

• من المناسب أن نرمز للمؤثرين a و a^+ بحروف قائمة (غير مائلة) .

•• يمكن أن نستبدل طاقة السوية الأساسية $\sum_q \hbar\omega_q\, {}^1\!/_2$ بالصفر إذاغيرنا مبدأ قياس الطاقة .

الذى يقل العدد n_q بواحد $(n_q \to n_q - 1)$ فهو مؤثر فناء الفونونات . ولقد درسنا هنا حالة خاصة وهى حالة الاهتزازات أحادية البعد بحيث يتحقق شروط وجود ذرة واحدة فى كل خلية ، وبنفس الطريقة يجرى التكميم فى الحالة العامة عندما يتساوى عدد الذرات فى الخلية بحيث تستطيع كل منها أن تهتز فى ثلاثة اتجاهات متعامدة ، ولذلك يجب علينا ، طبقا لازدياد عدد درجات الحرية ، أن ندخل الدليل α الذى يشير إلى نوع الاهتزاز ويتغير من 1 إلى 3ν ، بحيث تبقى صيغة الهاملتونيان من نفس النوع ، أى مثلما فى (28.72) بعد تبديل $\omega_q \to \omega_{q,\alpha}$ و $a_q \to a_{q,\alpha}$ و $n_q \to n_{q,\alpha}$ علما أن الجمع سيتم لا وفق q فقط وإنما وفق الدليل α أيضا أما طاقة الجملة فتساوى :

$$E = \sum_{q,\alpha} (n_{q,\alpha} + 1/2)\, \hbar\omega_{q,\alpha} \qquad (28.74)$$

ط) التأثير المتبادل بين الالكترونات والفونونات . الناقلية (الموصلية) الكهربائية . تتأثر الكترونات الناقلية أثناء حركتها بأى خلل يطرؤ على الدورية المثالية للشبكة ولذلك فإن تذبذب الشبكة يعتبر عاملا اضافيا هاما للوحة العامة لحركة الالكترونات فى البلورة ، ومن المفيد دراسة التأثير المتبادل بين الالكترونات والذرات المتذبذبة بطريقة النظرية الكوانتية للتأثير المتبادل بين الالكترونات والفونونات لأن ثمة تماثلاً معروفًا بين هذه الدراسة ومسألة التأثير المتبادل بين الالكترونات والمجال الكهرطيسى المكمم ، إذ يتجلى التأثير بين الالكترونات والشبكة بلغة النظرية الكوانتية عندئذ فى الانتقالات الكوانتية للالكترونات عند امتصاص الفونونات واصدارها ، وقد يؤدى هذا التأثير إلى ظواهر عديدة سنتوقف على اثنتين منها ، هما : تبدد الالكترونات على الفونونات (تعتبر هذه العملية أساسا لظاهرة المقاومة الكهربائية) والناقلية المفرطة (الموصلية فوق العالية) . فمن المعروف أن الطول الوسطى لمدى حركة الالكترونات يجب أن يبلغ

فى الشبكة البلورية المثالية الساكنة الأجزاء اللانهاية ، لأنه بالفعل ، فى نموذج بلوخ تعطى حالة الالكترون بالتابع $\psi_k = U_k(r) e^{ikr}$ علما أن سرعته فى هذه الحالة تحسب بالعلاقة $v = \frac{1}{h} \text{grad}_k E(k)$ وعند غياب التأثيرات الأخرى يبقى الالكترون فى الحالة المذكورة مهما طال الزمن .

غير أنه فى الظروف العادية تختلف الشبكات المعدنية عن الشبكة المثالية لأنها تخضع للتذبذبات الحرارية التى قد تؤدى إلى تبدد* الالكترونات ولما كان الالكترون فى شوطى امتصاص الفونونات واصدارها يغير اندفاعه شبه الذاتى لذا فإنه سيتحرك بشكل عشوائى وهذا ما يخلق المقاومة الكهربائية فى المعادن . ولندرس الآن مسألة تبدد الالكترونات فى الاهتزازات الطولانية (الصوتية) للشبكة بطريقة نظرية الاضطرابات معتبرين طاقة الاضطراب كمونا فعالا ما يحوى السعات المكممة لاهتزازات الشبكة ، فلنفترض أن لدينا بلورة متأينة وأن الايونات الموجبة والسالبة تتذبذب وفق قانون دورى بسعة واحدة ، عندها نستطيع كتابة انزياح الايونات المذكورة فى الاتجاهات المتعاكسة على شكل مركبات فورييه (فورير) التالية :

$$\delta r_l^+ = \frac{Q}{\sqrt{N}} e^{i\left(qr_l^+ - \omega t\right)}, \quad \delta r_l^- = -\frac{Q}{\sqrt{N}} e^{i\left(qr_l^- - \omega t\right)} \qquad (28.75)$$

حيث N عدد أيونات البلورة و Q سعة الاهتزازات و q المتجه الموجى . وباهمال الفرق بين احداثيات أيونات الخلية الواحدة نستطيع كتابة صيغة العزم ثنائى الأقطاب لجملة مؤلفة من أيونين بالشكل التالى :

$$\mathscr{P} = \frac{2Ze_0}{\Omega_0} \frac{Q}{\sqrt{N}} e^{i(qr - \omega t)} \qquad (28.76)$$

حيث Ω_0 حجم الخلية و Ze_0 شحنة الأيون و $\mathscr{P}$ متجه الاستقطاب (وفق

* سندرس التأثيرات (التشوهات) الأساسية للشبكة ، والتى تلعب دورا هاما فى عملية تبدد الالكترونات .

التعريف الالكتروديناميكى) ، وعندئذ تظهر كثافة الشحنة الموضعية ρ ، أى أن :

$$\operatorname{div} \mathscr{P} = -\rho$$

وباختصارها بواسطة معادلة بواصون :

$$\nabla^2\Phi = -4\pi\rho \qquad (28.77)$$

نجد عبارة الكمون الكهربائى الساكن ، أى أن

$$\Phi_q = \frac{4\pi \operatorname{div} \mathscr{P}}{\nabla^2} = -\frac{8\pi Z e_0}{\Omega_0 \sqrt{N}} \frac{iqQ}{q^2} e^{iqr - i\omega t} \qquad (28.78)$$

اذن نستطيع كتابة الطاقة الاضافية للتأثير الالكترونى الفونونى بالشكل التالى :

$$V(r) = -e\Phi = \frac{8\pi Z e_0^2}{\Omega_0 \sqrt{N}} \sum_q \frac{iqQ}{q^2} e^{i(qr-\omega t)} = \sum_q D_q \frac{iqQ}{\sqrt{N}} e^{i(qr-\omega t)} \qquad (28.79)$$

حيث

$$D_q = \frac{8\pi Z e_0^2}{\Omega_0 q^2} \qquad (28.80)$$

ويعتمد هذا الاستنتاج على المحاكمة المطبقة على البلورات الايونية فقط ، غير أننا نستطيع أن نعممه بادخال ما يسمى بكمون التشوه الذى يصف التأثير الالكترونى الفونونى ، أى أن :

$$V(r) = \sum_q D \frac{iqQ}{\sqrt{N}} e^{i(qr-\omega t)} \qquad (28.81)$$

ومن الآن فصاعدا سنقتصر على الاهتزازات الطولانية فقط (الاهتزازات الصوتية) التى من أجلها يكون q و Q متوازيين ولذلك فإن :

$$V(r) = \sum_q D \frac{iqQ}{\sqrt{N}} e^{i(qr-\omega t)} \qquad (28.82)$$

ويجب علينا الآن أن نبدّل سعة الاهتزازات البسيطة Q بمثيلاتها بواسطة

مؤثرات توليد الفونونات وافنائها (28.70) ، أى أن :

$$Q=\frac{X_q+X_q^+}{\sqrt{2}}=\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_q}}\,(a_q+a_q^+) \qquad (28.83)$$

ولنذكّر هنا أن a_q هو مؤثر الافناء و a_q^+ هو مؤثر توليد الفونون بتردد ω_q و M هى كتلة الذرة (الأيون) المتذبذبة . ولندرس الآن امتصاص الفونونات بطريقة نظرية الاضطرابات ، ولذلك نكتب الحد المقابل للامتصاص فى المؤثر الالكترونى الفونونى بالشكل التالى :

$$V^{abs}(r)=\sum_q V_q^{abs}, \quad V_q^{abs}=D\sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_q}}\,iqa_q e^{iqr-i\omega_q t} \qquad (28.84)$$

وبادخال الرمز :

$$V_q=iqD\left(\frac{\hbar}{2M\omega_q}\right)^{1/2} \qquad (28.85)$$

نكتب الصيغة النهائية من أجل طاقة الاضطراب بعد أن نعزل فيها القسم المستقل عن الزمن ، أى أن :

$$V_q^{abs}=V_q^{0\,abs}\,a_q e^{-i\omega_q t}, \quad V_q^{0\,abs}=\frac{V_q}{\sqrt{N}}\,e^{iqr} \qquad (28.86)$$

وباستخدام النظرية غير الراسخة للاضطراب (البند ٨) وبشكل مماثل لنظرية الاشعاع (البند ٩) نحصل من أجل احتمال الانتقالات الكوانتية للالكترون من الحالة k إلى الحالة k' مع امتصاص الفونونات على العبارة التالية :

$$w_{k,k'}=\frac{2\pi n_q}{\hbar}\,|\langle k'|V_q^{0\,abs}|k\rangle|^2\,\delta(\varepsilon(k')-\varepsilon(k)-\hbar\omega_q) \qquad (28.87)$$

حيث n_q ـ عدد الفونونات التى طاقتها $\hbar\omega_q$ و $\varepsilon(k)=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ طاقة الالكترون الطليق فى منطقة الناقلية ، أما العنصر المصفوفى $V_q^{0\,abs}$ فيجب أن يحسب بواسطة التوابع الموجية الالكترونية للحركة الطليقة ، أى أن

$$\psi_k(r)=\frac{1}{\sqrt{L^3}}e^{ikr} \qquad (28.88)$$

كان علينا بغية الدقة أن نأخذ توابع بلوخ لحالة الالكترونات فى البلورة غير المضطربة كتوابع موجية ، لكن وبتقريب جيد نستطيع أن نحسب حركة الالكترونات فى منطقة الناقلية بالموجات المستوية (28.88) ، وعندئذ نحصل من أجل العناصر المصفوفية (28.87) على أن :

$$\langle k' \mid V_q^{0\,\text{abs}} \mid k\rangle=\frac{V_q}{\sqrt{N}}\frac{1}{L^3}\int_{-L/2}^{L/2} e^{i(k+q-k')r}\,d^3x=\frac{V_q}{\sqrt{N}}\delta_{k+q,\,k'} \qquad (28.89)$$

وعليه فإن عملية امتصاص الفونون تخضع لقانونى مصونية الطاقة والاندفاع :

$$\varepsilon(k')=\varepsilon(k)+\hbar\omega_q \qquad (28.90)$$

$$k'=k+q \qquad (28.91)$$

ولذلك نجد من أجل احتمال الانتقال المتعلق بامتصاص الفونونات ما يلى :

$$w^{\text{abs}}_{k,\,k+q}=\frac{2\pi}{\hbar}\frac{|V_q|^2}{N}n_q\delta\left(\varepsilon(k+q)-\varepsilon(k)-\hbar\omega_q\right) \qquad (28.92)$$

لقد درسنا الآن عملية امتصاص الالكترون لفونون اندفاعه $\hbar q$ ، أى الانتقال الكوانتى $k'=k+q$ ، ومن الواضح أن عملية اصدار فونون اندفاعه $\hbar q$ (عندئذ $k'=k-(-q)=k+q$) ستماثل الانتقال $k'=k+q$ ، وبحساب مماثل سنحصل على الصيغة التالية :

$$w^{\text{em}}_{k,\,k+q}=\frac{2\pi}{\hbar}\frac{|V_q|^2}{N}(n_q+1)\,\delta\left(\varepsilon(k+q)-\varepsilon(k)+\hbar\omega_q\right) \qquad (28.93)$$

ويمكن الحصول على الاحتمال الكلى للانتقال الكوانتى المذكور بتبسيط النتائج أيضا لأن طاقة الفونون $\hbar\omega_q$ أصغر بكثير من طاقة الالكترون $\varepsilon(k)$ ، فبفرض أن $\hbar\omega_q=\hbar q v_0$ حيث v_0 سرعة الصوت ، وأن طاقة الالكترون تساوى $\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar k v_e}{2}$ ، ولما كانت سرعة الالكترونات v_e أكبر بكثير من سرعة الصوت لذا فى الحسابات القادمة سنهمل الحدود

$\hbar\omega_q$ التى تدخل فى متغير التابع - دلتا ، وبرمج المعادلتين (28.92) و (28.93) نجد أن :

$$w_{k,k+q} = \frac{4\pi}{\hbar}\frac{|V_q|^2}{N} n_q \delta[\varepsilon(k+q) - \varepsilon(k)] =$$
$$= \frac{2\pi}{\hbar}\frac{D^2 n_q}{NMv_0^2}\hbar\omega_q \delta[\varepsilon(k+q) - \varepsilon(k)] \quad (28.94)$$

وإذا اعتبرنا عدد الفونونات كبيرا جدا $n_q \gg 1$ لاستطعنا أن نهمل الواحد فى (28.94) بالمقارنة مع n_q ، عدا ذلك تبيّن من العلاقة (28.93) أن عملية التبدد قد تجرى حتى ولو خلت الحالة الابتدائية من الفونونات ، ومن السهل التأكد من ذلك لأن المضروب $n_q + 1$ لا يساوى الصفر ؛ كما ويمكن كتابة تبعية العدد الوسطى للفونونات لدرجة حرارة الشبكة بواسطة توزيع بوزى - اينشتين :

$$\bar{n}_q = \frac{1}{e^{\hbar\omega_q/k_B T} - 1} \quad (28.95)$$

وهكذا نستخلص عبارة احتمال الانتقالات الكوانتية للالكترون فى عملية التبدد $k \to k' = k + q$ ، أى :

$$w_{k,k+q} = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{D^2\hbar\omega_q}{NMv_0^2}\frac{1}{e^{\hbar\omega_q/k_B T} - 1}\delta[\varepsilon(k+q) - \varepsilon(k)] \quad (28.96)$$

ولكن ، عند حساب المقاومة الحرارية للمعادن يجب تركيز الاهتمام على مايسمى بعشوائية الاندفاع :

$$\frac{d\langle k\rangle}{dt} = \sum_{k'}(k' - k)\, w_{k,k'} = -\frac{\langle k\rangle}{\tau} \quad (28.97)$$

حيث τ البارامتر المسمى بزمن الارتخاء . وينتج معناه الفيزيائى من التعريف مباشرة لأن حل (28.97) يعتبر من النوع التالى :

$$\langle k(t)\rangle = k(0)\, e^{-t/\tau} \quad (28.98)$$

ولنلاحظ هنا أن ناقلية المعدن σ تتعلق بزمن الارتخاء τ بالعلاقة التالية :

$$\sigma = \frac{N_e e_0^2 \tau}{m} \quad (28.99)$$

حيث N_e عدد الالكترونات الحرة فى وحدة الحجم . وعليه نستنتج أنه لاستخلاص الناقلية لا بد من ايجاد المجموع (28.97) معتبرين أن $k' = k + q$ ، وبعد ادخال الزاوية θ الواقعة بين المتجهين k و q نجد بواسطة (28.97) أن :

$$\frac{1}{\tau} = -\sum_q w_{k,\, k+q} \frac{q}{k} \cos\theta \qquad (28.100)$$

ولندرس بعد ذلك الحالتين الحديتين :

١ ـ حالة درجات الحرارة العالية . فى هذه الحالة يكون $k_B T >> h\omega_q$ ولذلك نجد بواسطة (28.95) أن :

$$\overline{n}_q = \frac{k_B T}{\hbar\omega_q} \qquad (28.101)$$

وبتعويض هذه العلاقة فى الصيغة (28.96) والانتقال من المجموع (28.100) وفق q إلى التكامل ، أى أن :

$$\frac{1}{N\Omega_0}\sum_q = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q \qquad (28.102)$$

نجد أن

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{\Omega_0}{(2\pi)^3}\int_0^\infty q^2\, dq \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta \times$$
$$\times \left\{ \frac{q}{k}\cos\theta \frac{2\pi}{\hbar} \frac{D^2 k_B T}{M v_0^2} \delta\left[\frac{\hbar^2}{2m}(2kq\cos\theta + q^2)\right]\right\} \qquad (28.103)$$

علما أننا اعتبرنا أن $\omega_q = qv_0$ حيث v_0 سرعة الصوت ، وباجراء التكامل وفق الزاوية θ بواسطة التابع ـ دالتا ، وبالاختيار المناسب لحدى التكامل وفق dq (وفق قواعد تكامل التوابع ـ دلتا) نستخلص أن :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\Omega_0 D^2 k_B T}{4\pi\hbar M v_0^2} \frac{m}{k^3\hbar^2}\int_0^{2k} q^3\, dq = \frac{\Omega_0}{\pi} \frac{D^2 k_B T m k}{\hbar^3 M v_0^2} \qquad (28.104)$$

وينتج من هذه الصيغة أن زمن الارتخاء يتعلق بطاقة الالكترون المتبدد التى

تحوى المضروب k المتناسب طردا مع اندفاع الالكترون $\hbar k$. بعدئذ ، بملاحظة (28.99) نستنتج أن مقاومة المعادن تتعلق مع T بشكل خطى عند درجات الحرارة العالية .

٢ ـ حالة درجات الحرارة المنخفضة . فى هذه الحالة لا بد من استخدام الشكل الكامل لتوزيع بوزى ـ اينشتين (28.95) ، وعندئذ لا داع لاجراء التكامل وفق الزاوية Θ فى (28.103) ، وأما التكامل وفق q فيكون بالشكل الآتى :

$$\frac{1}{\tau}=\frac{\Omega_0}{4\pi}\,\frac{D^2}{\hbar^3}\,\frac{m}{Mv_0^2k^3}\,\frac{(k_BT)^5}{(\hbar v_0)^4}\int_0^\infty\frac{x^4dx}{e^x-1} \qquad (28.105)$$

حيث

$$x=\frac{\hbar\omega_q}{k_BT}=\frac{\hbar q v_0}{k_BT} \qquad (28.106)$$

علما أن حد التكامل العلوى بملاحظة الأسية تحت التكامل يسعى إلى اللانهاية ∞ * عندما $kT \ll h\omega_q$. و لقد تبين أن العلاقة المميزة هذه تصلح من أجل معادن كثيرة عند درجات الحرارة المنخفضة ، ويمكننا أن نستخلص دون الدخول فى الدراسة التفصيلية لمسألة المقاومة الكهربائية للأجسام الصلبة ، أنها تتجلى نتيجة لتبدد الكترونات الناقلية أثناء تفاعلها مع الفونونات أى مع الاهتزازات الصوتية للشبكة .

---

* لأن التكامل فى المساواة (28.105) يساوى :

$$\int_0^\infty\frac{x^4dx}{e^x-1}=24\,\zeta(5)$$

حيث 1,037 = (5) ζ وهى قيمة تابع ريمان (x) ζ عندما $x = 5$.

البند ٢٩ ـ النظرية الأولية للناقلية (الموصلية) المفرطة

أ) **حالة الناقلية المفرطة** . يبدو غريبا للوهلة الأولى أن الناقلية المفرطة تنتج أيضا عن تفاعل الالكترونات مع الفونونات ، وهكذا يمكن أن يؤدى تفاعل الالكترونات مع اهتزازات الشبكة إلى تشتت يسبب مقاومة كهربائية أو ناقلية مفرطة ، ومن الطريف ملاحظة أن النواقل الجيدة (الفضة والذهب والنحاس) لا تتحول إلى حالة الناقلية المفرطة وبالمقابل نرى أن التفاعل الالكترونى الفونونى القوى فى (Pb, Sn) الذى يؤدى إلى مقاومة كبيرة يمهد السبيل لتشكيل الناقلية المفرطة ، ومن المعلوم أن اكتشاف ظاهرة الناقلية المفرطة تم قبل انشاء النظرية المجهرية لهذه الظاهرة بكثير ، إذ تبين فى عام ١٩١١ أن مقاومة بعض المعادن تتضاءل (إلى قيمة لا يمكن قياسها فى الدرجات المنخفضة ($T - 0$)) (كاميرلينغ ـ أونست) ، وقد ثبت أيضا بالتجربة عام ١٩٣٣ أن الجسم مفرط الناقلية يدفع الحقل المغناطيسى المطبق عليه من الخارج وقد سميت هذه الظاهرة بظاهرة ميسنر ، أما تطور النظرية فقد بدأ متأخرا جدا عندما وضع لانداو وجينزبرغ نظرية فريدة لفرط الناقلية عام ١٩٥٠ وقد كان ذلك خطوة هامة فى هذا المجال لأن نظريتهما أحتوت على بعض النجاحات وبدت آداة جيدة فى التطبيق إلاّ أن محاولة الاقتراب من هذه الظاهرة من وجهة نظر مجهرية لم تنجح لزمن طويل ففى عام ١٩٥٠ ظهر اقتراح يعتبر أن التفاعل غير المباشر للالكترونات عن طريق الفونونات يؤدى إلى تجاذب خاص (فربليخ ، عام ١٩٥٠) وبعد أربعين سنة من الاكتشاف التجريبى لظاهرة الناقلية المفرطة أمكن الحصول على تفسيرها فى اطار النظرية المجهرية ، وقد تم ذلك بجهود (باردين وكوبر وشريفر وبوغولوبوف) حيث أن الأخير أعطى أفضل نظرية متكاملة لهذه الظاهرة . وقد كانت النظرية المجهرية لفرط الناقلية نجاحا عظيما للنظرية الكوانتية ومازال تطور هذه النظرية

يستمر حتى يومنا هذا ، ويجب ملاحظة أن الأداة الرياضية للنظرية شديدة التعقيد ، ويعود السبب فى ذلك إلى أن الوصف المتتالى للتفاعل الالكترونى-الالكترونى عن طريق حمل الالكترونات الفونونات لا يتطلب تكميم الحقل الصوتى وحده وإنما حقل الالكترونات والبوزيترونات أيضا ، وتعتبر مسألة حساب التفاعل الالكترونى-الالكترونى معقدة أيضا لأنه لا يمكن تطبيق الطرائق العادية لنظرية الاضطراب فى دراسة التفعل الالكترونى الفونونى . ولنحاول استخلاص المعنى الفيزيائى للنظرية طالما أننا لن نستطيع حلها بشكل كامل . ان إحدى المراحل الهامة فى هذه النظرية هو التفاعل الالكترونى الفونونى أو تبادل الفونونات الافتراضية بزوج الكترونى وهذا يعنى أن الكترونا يتعرض للتشوه الشبكى الناتج عن الكترون آخر وعندئذ سيبدو (كوبر ، عام ١٩٥٦) أن اصدار الفونون q من قبل الكترون اندفاعه $\hbar k$ وامتصاص هذا الفونون من قبل الكترون آخر اندفاعه $\hbar k'$ يسبب تفاعل الالكترونات ولهذا التفاعل طبيعة تجاذبية ، وهذا ما يقود إلى تشكيل حالة مرتبطة من الالكترونات تسمى بالأزواج الالكترونى (أزواج كوبر) ومن المهم ملاحظة أن أصغر طاقة تصل إليها هذه الأزواج تتم ضمن شروط تعاكس الاندفاعات والمغازل للالكترونين وعندئذ تتغير المميزات العامة لحركة الالكترونات ضمن هذه الشروط : حيث يتحركان بشكل مترابط أى أنهما يتحركان كأنهما مرتبطان وهذا يعنى من الناحية الطاقوية أن الطاقة العنصرية لزوج كوبر تصبح أخفض من E_F للالكترونات العادية وعندئذ يصبح الحد الأعلى للحالة الأساسية (حد فيرمى الأعلى) غير مستقر ويصبح تشكل الأزواج عملية مناسبة طاقويا ، ولنبرهن أن التفاعل بين الالكترونات يؤدى إلى عدم استقرار الحالة الأساسية (الناقلية غير المفرطة) للالكترونات ولذلك ندرس الكترونين معزولين عن غيرهما من الالكترونات ولكنهما يتفاعلان مع بعضهما ، وسنهمل التفاعلات الأخرى مع بقية الالكترونات ويمكن فى هذه الحالة كتابة التابع الموجى

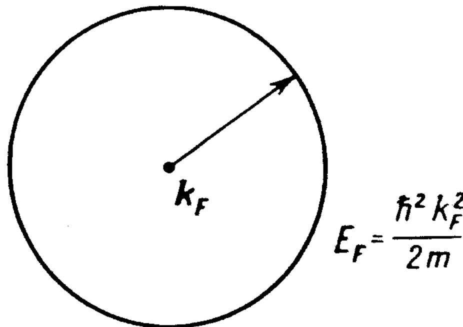
للالكترونين بدلالة احداثياتهما ، وبما أن للالكترونات ذات الاندفاعات والمغازل المتعاكسة أصغر طاقة ممكنة فى حالة الأزواج فيمكن أن نكتب ما يلى :

$$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2=0, \quad \boldsymbol{s}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2=0 \qquad (29.1)$$

أما التابع الموجى لهذا الزوج :

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)=\frac{1}{\Omega} e^{i\boldsymbol{k}_1(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)} \qquad (29.2)$$

حيث Ω مضروب المعايرة . وهذا التابع الموجى يصف الحالة الأساسية بدون أى تفاعل بين الالكترونات ، أما طاقة هذه الحالة فتساوى $2E_F$ ، ولندرس الآن حالة الناقلية المفرطة لجملة الكترونين دون أهمال تفاعلهما مع العلم أننا لن نتعرض الآن لطبيعة هذا التفاعل ولهذا نفرض أن جميع السويات ذات الطاقة ($E_F > E$) مملوءة بالالكترونات الأخرى أما الطاقة الصغرى للالكترونين المعزولين فتساوى $2E_F$ ، أنظر (29.2) ، ولحساب أخفض طاقة لجملة الالكترونين دون اهمال تفاعلهما سنبحث عن التابع الموجى بشكل تراكب حالات من أزواج الالكترونات التى تقع اندفاعاتها خارج كرة فيرمى ، أنظر الشكل ٢٩ ـ ١ ، أى أن :



الشكل ٢٩ ـ ١ . كرة فيرمى . الحالات من $k < k_F$ كلها مشغولة .

$$\psi(r_1, r_2) = \sum_{|k'|>k_F} a_{k'} e^{ik'R} \quad (29.3)$$

حيث $R = r_1 - r_2$. وإذا لم يحدث التفاعل الالكترونى الالكترونى فإن طاقة هذه الحالة ستكون طبعا أعلى من $2E_F$ ولكن وجود التفاعل يغير من هذه الصورة ، ولنحاول حساب المعاملات $a_{k'}$ دون اهمال تفاعل الالكترونات مع بعضها وعندئذ يجب أن يحقق التابع ψ (29.3) معادلة شرودينجر التالية :

$$\{H_0 + V\}\psi = E\psi \quad (29.4)$$

حيث $V = V_{ee}$ طاقة التفاعل الالكترونى و H_0 هاملتونيان الجملة بدون تفاعل ، أى أنه يساوى مؤثر الطاقة الحركية ، وبتبديل المعادلة (29.3) فى (29.4) نجد أن

$$\sum_{k'>k_F} a_{k'} (E - H_0) e^{ik'R} = \sum_{k'>k_F} e^{ik'R} V a_{k'} \quad (29.5)$$

وإذا لاحظنا أن :

$$H_0 e^{ik'R} = 2\varepsilon(k') e^{ik'R}, \quad \varepsilon(k') = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_0} \quad (29.6)$$

فإننا نحصل من (29.5) على المعادلة :

$$\sum_{k'>k_F} a_{k'} (E - 2\varepsilon(k')) e^{ik'R} = \sum_{k'} a_{k'} e^{ik'R} V \quad (29.7)$$

ولنضرب الآن طرفى (29.7) بالتابع المرافق :

$$\Phi^* = \frac{1}{\Omega} e^{-ikR} \quad (R = r_1 - r_2) \quad (29.8)$$

ثم نستكمل بكل الفراغ فنجد أن :

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{k'>k_F} a_{k'} (E - 2\varepsilon(k')) \int e^{iR(k'-k)} d^3x_1 d^3x_2 =$$

$$= \frac{1}{\Omega} \sum_{k'>k_F} a_{k'} \int e^{iR(k'-k)} V d^3x_1 d^3x_2 \quad (29.9)$$

وباعتبار صحة العلاقة :

$$\int e^{iR(k'-k)} d^3x_1 d^3x_2 = \Omega^2 \delta^2_{kk'} \qquad (29.10)$$

فاننا نحصل أخيرا على ما يلى :

$$a_k (E - 2\varepsilon(k)) = \frac{1}{\Omega^2} \sum_{k' > k_F} a_{k'} \int e^{iKR} V d^3x_1 d^3x_2$$

حيث $K = k' - k$ و $R = r_1 - r_2$ وهكذا حصلنا على معادلة لحساب المعاملات $a_{k'}$ فى شكل عام . ونلاحظ أنه لا يمكن تطبيق نظرية الاضطراب لأنها تؤدى إلى تناقض وإلى نتائج غير صحيحة ، ولنفرض بعض الفرضيات التى تؤمن لنا اجراء الحسابات حتى النهاية ، إذ يبدو أن الحل بشكل عام غير ممكن فلنفرض أن للتفاعل V شكلا بسيطا للغاية بحيث يمكن وضع التكامل (29.11) بشكل جداء ، أى أن :

$$\frac{1}{\Omega^2} \int e^{iKR} V d^3x_1 d^3x_2 = \lambda W_k W_{k'} \qquad (29.12)$$

حيث يقابل المضروب λ حالة تجاذب الالكترونات ($\lambda < 0$) أو حالة تدافعها ($\lambda > 0$) وهكذا نحصل من (29.11) على ما يلى :

$$a_k (E - 2\varepsilon(k)) = \lambda W_k \sum_{k' > k_F} a_{k'} W_{k'} \qquad (29.13)$$

مع العلم أن المجموع فى الطرف الأيمن لا يحوى k أى أنه يساوى مقدارا ثابتا

$$C = \sum_{k'} a_{k'} W_{k'} \qquad (29.14)$$

وبالتالى يكون

$$a_k = \frac{\lambda C W_k}{E - 2\varepsilon(k)} \qquad (29.15)$$

ولنعوض (29.15) فى (29.14) وتحذف a_k فنحصل على شرط وجود حل لا يساوى الصفر فى المعادلة :

$$1 = \lambda \sum_{k > k_F} \frac{W_k^2}{E - 2\varepsilon\,(k)} \qquad (29.16)$$

ومن هذه المعادلة ينتج أنه إذا تدافعت الالكترونات ($\lambda > 0$) فلا يوجد أى حل للمعادلة من أجل $E < 2E_F$ لأن الطرف الأيمن سيكون سالبا أما إذا تجانبت الألكترونات فإننا نحصل بعد ملاحظة $E < 2E_F$ فى المعادلة (29.16) على مجموع حدود موجبة لأن $\lambda < 0$ أى أنه يوجد حل لجملة الكترونين طاقتهما أخفض من $2E_F$ عندما تكون قيمة λ سالبة وهذه الطاقة أصغر من طاقة فيرمى للجملة بدون تفاعل ، وبالتالى توجد حالة خاصة متوافقة طاقتها صغرى تقع تحت طاقة الحالة الأساسية ، وهكذا نرى أن تشكل الأزواج عملية مناسبة طاقويا ، ومن الممكن الآن تقييم طاقة ارتباط الزوج الالكترونى ولهذا نعود إلى العبارة (29.16) ونحاول اجراء الحسابات حتى نصل إلى النتائج المقدارية فنفرض أولا أن :

$$W_k = \begin{cases} G, & E_F \leqslant \varepsilon \leqslant E_{max} \equiv E_m \\ 0, & \varepsilon > E_{max} \end{cases} \qquad (29.17)$$

حيث G ثابت ما و $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_0$ ، أما الجمع فيتم فى مجال صغير جدا k بجوار سطح كرة فيرمى ، ثم ندخل كثافة حالات أزواج الالكترونات $g(\varepsilon)$ وننتقل من المجموع إلى التكامل فنجد أن :

$$1 = \frac{\lambda G^2}{2} \int_{E_F}^{E_m} \frac{g\,(\varepsilon)\,d\varepsilon}{E - 2\varepsilon} \qquad (29.18)$$

وهنا ادخلنا المضروب $1/2$ للدلالة على أننا نأخذ من جميع الحالات الالكترونية تلك الحالات التى يكون فيها المغزلان متعاكسين لا غير ،

وبسبب صغر مجال التكامل يمكن اخراج التابع g خارج التكامل فى النقطة $E_F = \varepsilon$ وعندئذ نجد

$$1 = \frac{|\lambda| G^2 g(E_F)}{4} \ln \left| \frac{2E_m - 2E_F + \Delta}{\Delta} \right|$$

حيث $\Delta = 2E_F - E$ المقدار المميز لطاقة ارتباط الزوج . وعند تزاوج الالكترونات وانتقالها إلى الحركة المرتبطة ينخفض حد فيرمى. الأعلى بمقدار

$$E = 2E_F - \Delta \qquad (29.20)$$

ولنفترض أن $E_m - E_F = E_D$ حيث $E_D = \hbar\omega_D$ و ω_D هما على الترتيب طاقة وتواتر ديباى ويمثل هذا التواتر ، طبقا لنموذج ديباى ، أكبر تواتر لاهتزاز الشبكة البلورية أى أكبر تواتر للفونون وفى هذه الحالة نكتب المعادلة (29.19) بالشكل

$$1 = \frac{|\lambda| G^2 g}{4} \ln \left| \frac{2E_D + \Delta}{\Delta} \right| \qquad (29.21)$$

ومنه نجد طاقة الارتباط

$$\Delta = \frac{2E_D}{e^{\frac{4}{|\lambda G^2 g|}} - 1} \qquad (29.22)$$

وبما أن تفاعل الالكترونات يتميز بالمعامل الضعيف λG^2 فإن الأس يكون كبيرا جدا وعندئذ نحصل لطاقة الارتباط على العبارة التالية :

$$\Delta = 2E_D e^{-\frac{4}{|\lambda G^2 g|}} \qquad (29.23)$$

وهكذا تتناسب طاقة ارتباط الحالة المتوافقة ، أى طاقة ازواج كوبر ، مع طاقة ديباى $E_D = \hbar\omega_D$. وينتج من العبارة (29.23) أنه لا يجوز وضعها بشكل سلسلة (لأن الأس أكبر بكثير من الواحد) وبهذا نتأكد من عدم امكانية

تطبيق نظرية الاضطراب ، ونستنتج من كل ذلك أنه إذا تواجدت قوى تجاذب بين الالكترونات التى تتحرك فى الشبكة فإن هذه الالكترونات تبدأ بالتحول إلى الوضع المترابط : أى أنها تتحرك أزواجا أزواجا ، ويتألف كل زوج منها من الكترونين متعاكسى الاندفاع $(k_1\downarrow\uparrow k_2)$ ومتعاكسى المغزل $(s_1\downarrow\uparrow s_2)$ وهذه الحركة المترابطة هامة جدا لسبب آخر أيضا وهو أن المغزل الكلى للزوج يساوى الصفر أى أن زوج الالكترونات يخضع لاحصاءات بوزى ـ اينشتين ، فالزوج هو شبه جسيم بوزى ـ اينشتين ، ولهذا يمكن لجميع هذه الأزواج (عددها غير ثابت) أن تقع فى حالة كوانتية واحدة. ولم نتطرق عمدا فى المثال السابق إلى طبيعة التفاعل λG^2 بين الالكترونات . لقد ذكرنا سابقا أن الالكترونات تتفاعل مع بعضها عن طريق الكوانتات الافتراضية للحقل الصوتى للبلورة ، أى الفونونات العرضانية الافتراضية ولهذا التفاعل طبيعة تجاذبية ويمكن أن يفوق التفاعل الكولونى ويظهر فى مجال صغير لشبه الاندفاع بالجوار المباشر لحدود فيرمى جوار محدد بالشرط التالى :

$$\left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2 k^2{}_F}{2m_0} \right| < \hbar\omega_D$$

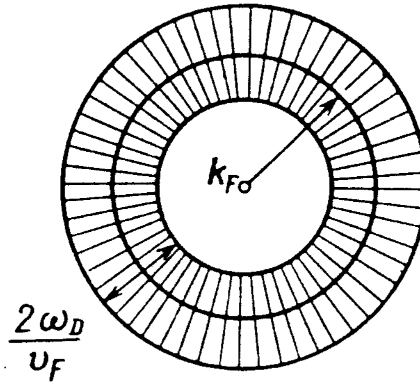
ومنه نحصل بعد الأخذ بعين الاعتبار العلاقة التالية :

$$\frac{\hbar k + \hbar k_F}{2m_0} \simeq \frac{\hbar k_F}{m_0} = v_F$$

(انظر الشكل ٢٩ ـ ٢) على الشرط التالى :

$$|k - k_F| < \frac{\omega_D}{v_F} \qquad (29.24)$$

وهكذا تنشأ الآلية التى تخلق الشروط المناسبة لتشكيل أزواج كوبر حيث تصبح حركة الالكترونات مرتبطة وتسلك سلوك جسيمات بوزى ـ اينشتين ، وان طاقة الأزواج صغيرة جدا بصورة عامة ويكفى رفع درجة الحرارة



الشكل ٢٩ ـ ٢ . مجال التفاعل الفعال بين الالكترونات فى عملية تشكل الأزواج .

قليلا حتى يبدأ الاضطراب الحرارى بتهديم الزوج أى أنه يفك الحالة المتوافقة ، ولكن لا بد من صرف طاقة ليست أقل من Δ حتى يتفكك الزوج ، ولهذا تصبح الحركة المتوافقة للأزواج مستقرة فى درجات الحرارة المنخفضة وتكون الأزواج الالكترونية التى تخضع لاحصاءات بوزى - اينشتين فى نفس الحالة ، بحيث تظهر أزواج تتحرك بشكل متوافق . ولندخل فى النظرية المجهرية الكوانتية للناقلية المفرطة مفهوما جديدا بجانب مفهوم الحالة الأساسية للعنصر مفرط الناقلية (أزواج كوبر) وهو مفهوم الاثارات أو أشباه الجسيمات التى يعطى طيف طاقتها بالعلاقة التالية :

$$E(k) = \sqrt{\xi^2(k) + \Delta^2(k)} \qquad (29.25)$$

حيث $\xi(k) = \hbar^2 k^2 / 2m_0 - \hbar^2 k_F^2 / 2m_0$ هى الطاقة الحركية للاضطراب محسوبة اعتبارا من سطح فيرمى و Δ هى الثغرة الطاقوية التى تتبع شبه الاندفاع بحدّة ، ويمكن اعتبار Δ مقدارا ثابتا معينا بالعلاقة (29.22) ضمن المجال الفعال لتفاعل الالكترونات $\hbar\omega_D$ (طاقة ديباى) ، ولكن Δ لا تبلغ هذه القيمة إلا فى الدرجات المنخفضة جدا ($T - 0$) وبارتفاع درجات الحرارة تبدأ Δ بالتناقص ، وعند الوصول إلى درجة حرجة T_c تنعدم Δ وبعد

هذه الدرجة $T > T_c$ لا يمكن أن تحدث حالة فرط الناقلية بسبب غياب الثغرة الطاقوية ($\Delta = 0$ عندما $T > T_c$) ، وترتبط النهاية العظمى للطاقة Δ مع درجات الحرارة الحرجة للانتقال الطورى فى حالة الناقلية المفرطة بالعلاقة :

$$\Delta \approx k_B T_c \qquad (29.26)$$

حيث K_B ثابت بولسمان $T_c \sim 20\ K$ و ($T_D \sim 100\ K$) . ويعتبر وجود فجوة (ثغرة) طاقوية فى طيف الطاقة المثار (المهيج) نقطة انعطاف فى نظرية فرط الناقلية ولا توجد هنا حالات تقع على بعد صغير جدا من الحالة الأساسية ، كما يحدث فى المعدن العادى ولهذا تكون حالات الناقلية المفرطة ضمن هذا المفهوم شبيهة بنصف ناقل عرض منطقته المحظورة 2Δ (نذكر فى العلاقة (29.25) الفرع الموجب من الجذر التربيعى وهو الفرع الموافق لطاقة اثارة الكترون ، أما طاقة اثارة الثغرة فتوصف بالفرع السالب) وبالتالى تكون أصغر طاقة اثارة مساوية 2Δ عندما $k = k_F$. أما إذا حرضنا تيارا فى النواقل مفرطة الناقلية فلا يمكن لعمليات التشتت العادية أن تسبب تخامد التيار لأن الحالات الأساسية المتوافقة مستقرة ولكى يزول استقرارها وتحدث الاثارة لا بد من صرف طاقة تساوى طاقة ارتباط أزواج كوبر 2Δ ، وهذا ما يفسر الخواص الغريبة لمثل هذه النواقل . ولندرس الآن مفهوما يتعلق بالتابع الموجى للحالة مفرطة الناقلية ، فلقد ذكرنا سابقا أنه يحدث فى درجات الحرارة المنخفضة تنظيم داخلى لحركة الالكترونات ، أى تزواج ينشأ عنه جملة كوانتية مرئية هى عبارة عن مكثف يمثل الحالة الأساسية لجملة أزواج الالكترونات الخاضعة لاحصاءات بوزى ، وانطلاقا من فكرة التنظيم الكلى الداخلى لحركة الأزواج ، من الطبيعى فرض تابع موجى ψ منسوب للمكثف المرتبط بحالة الناقلية المفرطة يمكن كتابته بالشكل التالى :

$$\psi = \sqrt{\rho}\, e^{i\varphi} \qquad (29.27)$$

حيث $\rho(r, t)$ و $\varphi(r, t)$ تابعان حقيقيان . وعندئذ نحسب من العبارة العامة للكثافة الاحتمالية لتيار الأزواج ذى الشحنة $q = 2e$ فى الحقل المغناطيسى $\mathcal{H} = \text{rot}\, \boldsymbol{A}$ أن

$$\boldsymbol{j} = -\frac{i\hbar}{2m_0}\{\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\} - \frac{q\boldsymbol{A}}{m_0 c}\psi^*\psi \qquad (29.28)$$

وإذا بدلنا التابع (29.27) فى هذه العبارة فإننا نجد

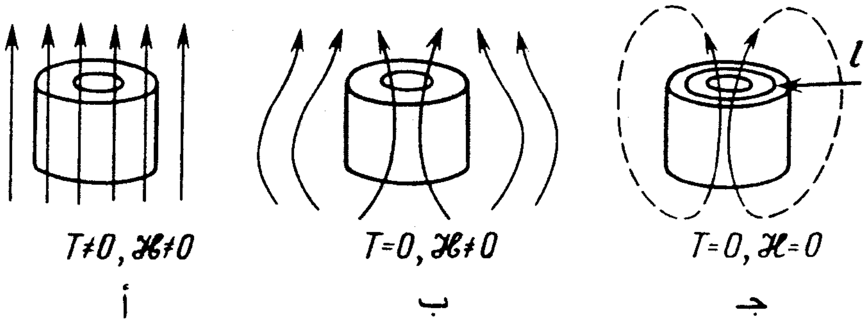
$$\boldsymbol{j} = \left\{\frac{\hbar}{m_0}\nabla\varphi - \frac{q}{m_0 c}\boldsymbol{A}\right\}\rho \qquad (29.29)$$

ويكون الطور φ هنا مقدارا قابلا للقياس ، ومن المهم التأكيد مرة أخرى أن حالات فرط الناقلية تتميز بالتوافق المرئى (الماكروسكوبى) ولهذا يكون التابع الموجى (29.27) مناسبا لكل النماذج ويصف كل المجموعة ، هذا ويتألف التابع الموجى فى النظرية الدقيقة لفرط الناقلية من توابع الكترونية عادية شديدة التعقيد ، والقيمة المطلقة للتابع ψ فى إطار التكميم الثانى تعطى بالعلاقة :

$$\langle\psi\rangle \simeq \frac{\Delta}{\bar{V}_{\text{int}}} \qquad (29.30)$$

حيث Δ طاقة ارتباط الزوج و $\bar{V}_{\text{int}}$ متوسط طاقة تفاعل الالكترونات وهكذا ينعدم التابع الموجى لحالة فرط الناقلية عندما $\Delta \to 0$.

ب) **تكميم التدفق المغناطيسى فى النواقل المفرطة** . يمكن الاستفادة من خواص الناقلية لتوضيح مجموعة ظواهر تحدث فى هذه النواقل المفرطة . فلندرس أولا ظاهرة تستدعى الاهتمام وهى تكميم التدفق المغناطيسى المار خلال حلقة مفرطة الناقلية ، ولتكن حلقة من هذا النوع موضوعة فى حقل مغناطيسى فى الدرجة العادية (الشكل ٢٩ ـ ٣ ، أ)



الشكل ٢٩ ـ ٣ . مرور التدفق المغناطيسى عبر حلقة هائلة الناقلية .

حيث تمر خطوط الحقل المغناطيسية من خلال جسم الحلقة ، ولكن عندما تبرد الحلقة إلى درجة قريبة من الصفر المطلق فإن الحقل المغناطيسى يدفع منها (ظاهرة ميزنـر ، عام ١٩٣٣) (انظر الشكل ٢٩ ـ ٣ ، ب) . وبعد الدخول فى حالة فرط الناقلية يبقى قسم من التدفق المغناطيسى مارا عبر ثقب الحلقة حتى ولو نزعنا الحقل تماما (الشكل ٢٩ ـ ٣ ، جـ) ، حيث يبقى تيار فرط الناقلية المار عبر جسم الحلقة من التدفق المغناطيسى ثابتا ؛ فكان الحقل المغناطيسى « جمد » فى هذه الحلقة ، وبما أن كثيرا من الالكترونات تتحرك فى الحلقة فى وضع مرتبط ، فيجب أن تظهر الخواص الكوانتية فى الجملة الماكروسكوبية ، وبالفعل يبدو أن التدفق المغناطيسى « الاسير » وكأنه ظاهرة كوانتية ، ولندرس هذه الظاهرة انطلاقا من تابع فرط الناقلية (29.27) وكثافة التيار (29.29) ، وفى الدرجة $T=0$ فى حالة غياب الحقل المغناطيسى ضمن مادة الحلقة ، ولهذا يكون

$$\mathscr{H}=0, \quad \operatorname{rot}\mathscr{H}=\frac{4\pi}{c}\,j=0, \quad j=0 \qquad (29.31)$$

ويمكن أن يلاحظ التيار المختلف عن الصفر قرب سطح الحلقة فقط وعلى العمق الذى يستطيع الحقل المغناطيسى الوصول إليه . ولنختار المنحنى المغلق l الذى نستكمل عليه ، فى جسم الحلقة (الشكل ٢٩ ـ ٣ ، جـ) ، وعندئذ يكون

$$\oint_l j\, dl = 0 \qquad (29.32)$$

ثم نأخذ كثافة التيار من (29.29) والتى حصلنا عليها لحالة الناقلية المفرطةي وهى

$$j = \left(\frac{\hbar}{m_0} \nabla\varphi - \frac{q}{m_0 c} A\right)\rho$$

وبما أن$\rho_0 = \rho$هى كمية ثابتة على المنحنى التكاملى فيمكن كتابة (29.32) بالشكل التالى :

$$\frac{\hbar c}{q} \oint_l \operatorname{grad}\varphi\, dl = \oint A\, dl \qquad (29.33)$$

وبما أن

$$\oint A\, dl = \int \operatorname{rot} A\, dS = \int \mathscr{H}\, dS = \Phi \qquad (29.34)$$

حيث Φ التدفق المغناطيسى المغصوب فى الحلقة ، وأن

$$\oint_l \operatorname{grad}\varphi\, dl = \oint \frac{d\varphi}{dl}\, dl = \oint d\varphi = 2\pi n \qquad (29.35)$$

حيث $n = 0,1,2,\ldots$ عدد يميز التغير الكلى للطور فإننا نجد أخيرا أن :

$$\Phi = 2\pi n \frac{\hbar c}{q} \qquad (29.36)$$

أى أن التدفق المغناطيسى المغصوب هو ظاهرة كوانتية لأنها تساوى أضعاف تكميم التدفق Φ_0 الذى يساوى

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{q} \qquad (29.37)$$

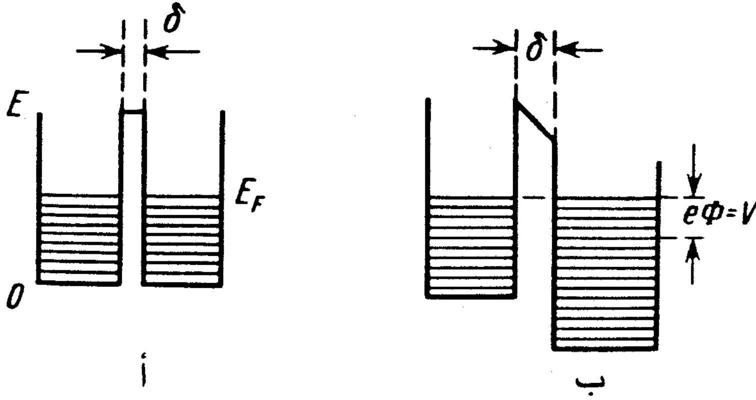
وهذا مقدار صغير جدا ويمكن كتابته بالشكل :

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\mu_0}{r_0}$$

حيث $\mu_0 = e_0\hbar/2m_0c$ مغناطيون بور و $r_0 = e^2/m_0c^2$ نصف القطر الكلاسيكى للالكترون ، ولهذا ينبغى لكشف هذه الظاهرة تجريبيا إجراء قياسات فائقة الدقة إذ أن Φ_0 التدفق المغناطيسى الناتج عن الكترون وحيد ، ويكون الحقل المغناطيسى (29.36) فى الواقع أجزاء مئوية من الحقل المغناطيسى الأرضى وقد برهن التحقيق التجريبى للعلاقة (29.36) كل من دول ونابور وفيربانك وديفر عام ١٩٦١ على صحة النتائج النظرية. وتبين أن الشحنة q تساوى ضعف شحنة الالكترون $q = 2e_0$ وهذا دليل حاسم لصالح فرط الناقلية التى تؤكد أن التدفق المغناطيسى يتشكل نتيجة لحركة الالكترونات المتزاوجة ، وهكذا اكتشف مظهر جديد لقوانين الميكانيكا الكوانتية فى الظواهر المجهرية .

جـ) ظاهرة النفق فى النواقل المفرطة (ظاهرة جوزيفسون) . تعتبر ظاهرة النفق إحدى أبرز ظواهر الخواص الموجية للجسيمات كما وتعتبر من أهم نجاحات الميكانيكا الكوانتية فى كشف قانونية « العالم المجهرى » ، وقد بدأ الباحثون مؤخرا بإعطاء أهمية خاصة لظاهرة النفق فى النواقل المفرطة لأن التنبؤات النظرية والخواص المحققة تجريبيا تؤكد أن لهذه الظاهرة أهمية * تطبيقية كبرى . ولكى نفهم ظاهرة جوزيفسون بشكل أفضل ، ندرس أولا ظاهرة النفق العادية فى المعادن ، وتعتبر هذه العملية معاكسة تماما لظاهرة فرق الكمونات التماسى . ولندرس أولا نموذجا مؤلفا من معدنين مفصولين بعازل ثخنه δ ، وبما أننا سنفرض تشابه حدود فيرمي فى الناقلين (لن يوجد تيار) فإن الالكترونات ستكون فى وضع متوازن (انظر الشكل ٢٩ ـ ٤ ، ا) وبتطبيق فرق الكمون $V = e\Phi$ على المعدنين فإن حدود فيرمى ستزاح بالنسبة لبعضها ، (انظر الشكل ٢٩ ـ ٤ ، ب) وعندئذ يظهر تيار تتناسب قيمته مع فرق الكمونين ، وفى الحقيقة يؤدى

* لقد تنبأ جوزيفسون نظريا بظاهرة النفق فى النواقل المفرطة ، وقد لوحظت هذه الظاهرة تجريبيا ، وقد نال جوزيفسون جائزة نوبل عام ١٩٧٣ تقديرا لدوره فى أبحاث ظاهرة النفق فى الأجسام الصلبة .



الشكل ٢٩ ـ ٤ . عملية النفق من أجل الالكترونات فى المعادن .

انزياح سويات طاقة الالكترونات بمقدار $\Delta E = e\Phi = V$ إلى ظهور حقل كهربائى $\mathscr{E} = \Phi/\delta$ فى منطقة التماس وهذا ما يسبب تيارا ، ومن الواضح أنه لا يجرى شحن المعدنين فى هذه الحالة ولهذا لا تتغير كثافة الالكترونات كما لا يتغير وضعى سويتى فيرمى ، ولنحسب الآن تيار عملية النفق ولذلك نفرض أن الكترونا يقع فى حالة ذات شبه اندفاع $\hbar k$ أى أن $E = E(k)$ وعندئذ يمكن كتابة تيار عملية النفق بالشكل التالى :

$$J(k) = D(k)\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(k)}{\partial k}\frac{e}{L} = D(k)\frac{ev}{L}. \qquad (29.38)$$

حيث $D(k)$ معامل شفافية الحاجز و e شحنة الالكترون و L ثخن المعدن أما $v = \frac{\partial E}{\partial \hbar k}$ فهى سرعة الالكترون ، وعندئذ يساوى التيار الكلى J إلى :

$$J = \sum_s \sum_k \frac{eD(k)}{L}\frac{\partial E}{\partial \hbar k} = \frac{2e}{2\pi\hbar}\int D(k)\frac{\partial E}{\partial k}dk = \frac{e}{\pi\hbar}\int_{E_F - e\Phi}^{E_F} D(E)\,dE, \qquad (29.39)$$

حيث يعطى فعل المغازل بالمعامل 2 كما أننا انتقلنا من المجموع إلى التكامل لأن معامل الشفافية k الذى يعطى بالعلاقة (انظر 5.56) :

$$D = \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int^{x_2} \sqrt{2m_0(V-E)}\, dx \right] \qquad (29.40)$$

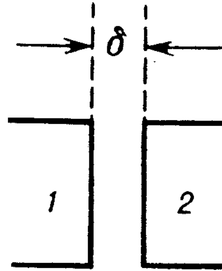
يحوى الكمون Φ (مقدار صغير) وهو تابع انسيابى بشكل،كاف فيمكن اعتبار D ثابتا تقريبا وإخراجه خارج التكامل حيث يكون

$$D(E) = D(E_F) = \bar{D} \qquad (29.41)$$

وعندئذ نجد

$$J = \frac{e}{\pi\hbar} \bar{D} e\Phi = \text{const}\,\Phi = \frac{V}{R} \qquad (29.42)$$

حيث $R = \frac{\pi\hbar}{e\bar{D}}$ المقاومة الكهربائية . وهكذا نرى أن عملية النفق فى المعادن العادية تؤدى إلى ظهور تيار كهربائى يتناسب مقداره مع فرق الكمون أى أن قانون أوم صحيح فى هذه الحالة ، ولندرس الآن هذه الظاهرة فى النواقل المفرطة ، ويعتبر هذا مثالا جديدا على عبور الجسيمات خلال حاجز كمونى (نقصد بالجسيمات فى حالتنا هذه أزواج الالكترونات) ، فعندما نقرب ناقلين مفرطين من بعضهما (الشكل ٢٩ ـ ٥) ، نلاحظ أن



الشكل ٢٩ ـ ٥ . مخطط الظاهرة النفقية فى النواقل المفرطة .

انتقالات جوزيفسون الكوانتية تبدو للوهلة الأولى ذات خواص غير متوقعة . وسنعطى الآن وصفا تقريبيا كيفيا لهذه الظاهرة ولهذا نتبع الطريقة إلى اقتراحها فينمان وهى الطريقة التى لاقت الآن عدة تطبيقات ، حيث سندرس سلوك الالكترونات المتزاوجة (أزواج الالكترونات) فى حالة الناقلية المفرطة بواسطة التابع الموجى (29,27) وعندئذ يجب أن يحقق التابعان الموجيان ψ_1 و ψ_2 للناقلية المفرطة معادلتى شرودينجر التاليتين :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi_1 = V_1\psi_1 + k\psi_2$$
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi_2 = V_2\psi_2 + k\psi_1 \qquad (29.43)$$

وهنا لن ندرس سوى الحالة الأساسية ولهذا يمكن أن نهمل الطاقة الحركية بسبب صغر الاندفاعين ، أما V_1 و V_2 فهما كمونا الناقلين المفرطين الأول والثانى على الترتيب و k ثابت ما يتعلق بالانتقال ، أى أنه يحدد علاقة الناقلين ببعضهما ، ولقد فهم طبيعة هذا الثابت تماما فى ضوء النظرية المجهرية أما هنا فيكون استخدامنا لـ k شكليا لا غير ، ولنفرض الآن أننا طبقنا على الناقل المفرط فرق كمون يساوى

$$V_1 - V_2 = qV \qquad (29.44)$$

حيث $q = 2e$ شحنة الزوج و V فرق كمون البطارية ، ولكى تكون الحسابات أكثر تناسقا نكتب $V_1 = q\,V/2$ و $V_2 = -q\,V/2$ وعندئذ تتحول مجموعة معادلتى شرودينجر إلى الشكل التالى :

$$i\hbar\dot{\psi}_1 = \frac{qV}{2}\psi_1 + k\psi_2$$
$$i\hbar\dot{\psi}_2 = -\frac{qV}{2}\psi_2 + k\psi_1 \qquad (29.45)$$

ثم ننتقل إلى عبارة التابع الموجى (29.27) لحالة فرط الناقلية ، أى أن :

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \sqrt{\rho}\, e^{i\varphi}, \quad \rho = \rho(\boldsymbol{r}, t), \quad \varphi = \varphi(\boldsymbol{r}, t) \qquad (29.46)$$

فنحصل على مجموعة أربع معادلات تربط ρ و φ وهى التالية :

$$\dot{\rho}_1 = \frac{2k}{\hbar}\sqrt{\rho_1\rho_2}\,\sin\alpha, \quad \dot{\varphi}_1 = -\frac{k}{\hbar}\sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}}\cos\alpha - \frac{qV}{2\hbar} \qquad (29.47)$$
$$\dot{\rho}_2 = -\frac{2k}{\hbar}\sqrt{\rho_1\rho_2}\,\sin\alpha, \quad \dot{\varphi}_2 = -\frac{k}{\hbar}\sqrt{\frac{\rho_1}{\rho_2}}\cos\alpha + \frac{qV}{2\hbar}$$

حيث $\alpha = \varphi_2 - \varphi_1$ ، وفى هذه المعادلات نجد مباشرة أن $\dot{\rho}_1 + \dot{\rho}_2 = 0$ أى أن أحد الناقلين يفقد شحنته بنفس السرعة التى يكتسبها الآخر منه ، وبما

أن أى تناقص فى الشحنة يجب أن يعوضه مصدر الجهد (البطارية) فلابد أن يبقى متوسط الشحنة الشكلية ثابتا ونستطيع أن نكتب :

$$\rho_1 \approx \rho_2 = \rho_0 \qquad (29.48)$$

وهكذا يمر بين الناقلين المفرطين التيار التالى :

$$J = \dot{\rho}_1 = -\dot{\rho}_2 = \frac{2k}{\hbar}\rho_0 \sin\alpha = J_0 \sin\alpha \qquad (29.49)$$

ونلاحظ أنه فى النظرية الدقيقة لفرط الناقلية يكون $J_0 \sim D\Delta$ حيث Δ عرض الثغرة الطاقوية للناقل المفرط ، وطبقا لهذه الفرضيات نستطيع الحصول من الزوج الثانى من المعادلات (29.47) على ما يلى :

$$\dot{\varphi}_2 - \dot{\varphi}_1 = \dot{\alpha} = \frac{qV}{\hbar} \qquad (29.50)$$

حيث $\rho_2 = \rho_1 = \rho_0$ ، ولهذا نجد أن :

$$\alpha = \alpha_0 + \frac{q}{\hbar}\int_0^t V\,dt \qquad (29.51)$$

وهكذا نرى أن المعادلتين التاليتين :

$$J = J_0 \sin\alpha, \qquad \alpha = \alpha_0 + \frac{q}{\hbar}\int_0^t V\,dt \qquad (29.52)$$

تصفان ظاهرة النفق فى النواقل مفرطة الناقلية (ظاهرة جوزيفسون) ، ولذلك ندرس نتائجها :

١ ـ ظاهرة جوزيفسون الراسخة : لنفرض أنه لم يطبق أى فرق كمون على جملة الناقلين المفرطين أى أن $V = 0$ وبالرغم من ذلك يختلف التيار فى هذه الحالة عن الصفر

$$-J_0 \leqslant J \leqslant J_0 \qquad (29.53)$$

أما قيمة هذا التيار فتتعين بفرق الطورين $\varphi_2 - \varphi_1$ ، ويجدر التنويه إلى أن الطور φ الذى يدخل فى عبارة التابع (29.27) هو مقدار مقاس لأن التابع نفسه يقابل الحالة المتوافقة للناقلية المفرطة ، وتبدو هذه النتيجة ($V = 0$ ، $J \neq 0$) فى تناقض حاد مع القوانين العادية لظاهرة النفق ، أنظر (29.42) .

٢ ـ ظاهرة جوزيفسون غير الراسخة . لنفرض أننا طبقنا على مجموعة النواقل المفرطة فرق الكمون $V = V_0$ وعندئذ نجد من (29.52) أن :

$$\alpha = \alpha_0 + \frac{q}{\hbar}\int_0^t V\,dt = \alpha_0 + \frac{qV_0}{\hbar}t \qquad (29.54)$$

أما التيار فيساوى عندئذ

$$J = J_0 \sin\alpha = J_0 \sin\left(\alpha_0 + \frac{qV_0 t}{\hbar}\right) \qquad (29.55)$$

ونلاحظ أن $\omega_j = \frac{2e\,V_0}{h}$ هو مقدار كبير (تواتر جوزيفسون) ، وهكذا نرى أنه عندما يتلامس ناقلان مفرطان ويطبق بينهما كمون ثابت V_0 فلا بد أن ينشأ تيار بينهما يتذبذب بسرعة مع الزمن بتواتر $\omega_j = \frac{2e\,V_0}{h}$ وينعدم هذا التيار عندما نوسط بالزمن .

٣ ـ الظاهرة التجاوبية : لندرس ما يحدث عندما نطبق على الناقلين المذكورين التواتر التالى

$$V = V_0 + v\cos(\Omega t + \theta) \qquad (29.56)$$

وعندئذ نجد أن :

$$\alpha = \alpha_0 + \frac{q}{\hbar}\int_0^t V\,dt = \alpha_0 + \omega_j t + \frac{qv}{\hbar\Omega}\sin\Omega t \qquad (29.57)$$

(وقد جعلنا $\theta = 0$ توخيا للتبسيط) وهكذا نحصل على تيار ظاهرة النفق التالى :

$$J = J_0 \sin\left\{\alpha_0 + \omega_j t + \frac{qv}{\hbar\Omega}\sin\Omega t\right\} \qquad (29.58)$$

ولكى تتم مناقشة هذه العلاقة نختار $v \ll V_0$ وعندئذ نجد بالنشر أن :

$$\sin\left[\alpha_0 + \omega_j t + \frac{qv}{\hbar\Omega}\sin\Omega t\right] \simeq \sin(\alpha_0 + \omega_j t) + \\ + \frac{qv}{\hbar\Omega}\sin\Omega t\cos(\alpha_0 + \omega_j t) + \dots \qquad (29.59)$$

أما التيار J فيساوى

$$J = J_0\left[\sin(\alpha_0 + \omega_j t) + \frac{qv}{\hbar\Omega}\cos(\alpha_0 + \omega_j t)\sin\Omega t\right] \qquad (29.60)$$

وينعدم الحد الأول عند التوسيط بالزمن نتيجة للتذبذب السريع أما الحد الثانى فلا يساهم فى التيار إلا عندما تتحقق شرط التجاوب $\Omega = \omega_j$. وهكذا تمت دراسة الانتقالات النفقية لأزواج الالكترونات فى النواقل المفرطة ، ولا تعتبر ظاهرة جوزيفسون نتيجة هامة للنظرية العامة للنواقل المفرطة فحسب بل انجازا هاما للنظرية على طريق التطبيقات العملية فى كثير من المجالات والتى من أهمها مسائل التوليد الكوانتى للأمواج الكهرطيسية ، واختراع الصمامات الثنائية النفقية مفرطة الناقلية التى تستخدم فى الأمواج الدقيقة والمناطق تحت الحمراء وفى خلايا الذاكرة فى الحاسبات الالكترونية وفى عدد آخر من المسائل التطبيقية .

البند ٣٠ - حركة الكترون فى حقل مغناطيسى ثابت ومتجانس

من المهم فى كثير من المسائل النظرية المعاصرة لتفاعل الجسيمات والحقول إيجاد حلول لمعادلة ديراك التى تدرس الحالات الكوانتية للفرميونات فى حقل خارجى وبواسطة هذه الحلول يمكن تحليل سلوك الجسيمات فى ظروف الطاقات العالية وبحث الظواهر اللاخطية فى مسألة الاشعاع ودراسة تفاعل الجسيمات مع الأمواج الكهرطيسية القوية (حزم

اللازير) وغيرها . وفى جميع هذه المسائل يفرض أن الجسيم مقيد ويدخل الحقل الكهرطيسى فى الوصف الدقيق للحالة الكوانتية . وترتكز مراحل حل مسألة تفاعل الجسيمات مع الفونونات على المعرفة الدقيقة للتابع الذى لا يهمل تأثير الحقول الخارجية عند استنتاجه (تمثيل فرى) .

أ) التابع الموجى . لنبدأ بحل معادلة ديراك للالكترون النسبى المتحرك فى حقل مغناطيسى ثابت ومتجانس وموجه باتجاه المحور z فى جملة الاحداثيات الاسطوانية r,φ,z ويبدو أن هذه الاحداثيات أكثر ارتباط بخواص الالكترون وطبقا لذلك سنختار الكمون A للمسألة بالشكل :

$$A_x = -\frac{1}{2} y\mathscr{H}, \quad A_y = \frac{1}{2} x\mathscr{H}, \quad A_z = 0 \qquad (30.1)$$

ولا يتعلق هذا المقدار بالزمن وهذا ما يؤمن الانتقال من معادلة ديراك التالية :

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathrm{H}\right) \psi = 0 \qquad (30.2)$$

إلى المسألة الراسخة لأن الهاملتونيان :

$$\mathrm{H} = c\,(\alpha \mathbf{P}) + \rho_3 m_0 c^2, \quad \mathbf{P} = \mathbf{p} + \frac{e_0}{c} A = -i\hbar\nabla + \frac{e_0}{c} A \qquad (30.3)$$

لا يتعلق بصورة صريحة بالزمن ، ولنفرض :

$$\psi(r, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon E t}\, \psi(r) \qquad (30.4)$$

حيث يختص المقدار $\varepsilon = \pm 1$ بإشارة الطاقة و$E = c\hbar K > 0$ هى القيمة المطلقة للطاقة ، أما مركبات التابع الموجى $\psi(r)$ فهى تحقق جملة المعادلتين :

$$\begin{aligned}(\varepsilon E \mp m_0 c^2)\, \psi_{1,3} - c\,(\mathrm{P}_x - i\mathrm{P}_y)\, \psi_{4,2} - c\mathrm{P}_z \psi_{3,1} = 0 \\ (\varepsilon E \mp m_0 c^2)\, \psi_{2,4} - c\,(\mathrm{P}_x + i\mathrm{P}_y)\, \psi_{3,1} + c\mathrm{P}_z \psi_{4,2} = 0\end{aligned} \qquad (30.5)$$

وحيث تنفصل المتحولات r,φ,z (وهنا تكمن البساطة الناتجة عن تجانس الحقل المغناطيسى) ، ولنكتب التابع الموجى $\psi(r)$ بالشكل التالى :

$$\psi(r) = \psi(l,\ k_3) f \qquad (30.6)$$

حيث تكون التوابع

$$\psi(l,\ k_3) = \frac{e^{ik_3z}}{\sqrt{L}} \frac{e^{i(l-1/2)\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (30.7)$$

متعامدة ، أى أن :

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-L/2}^{L/2} dz\, \psi^*(l',\ k_3')\, \psi(l,\ k_3) = \delta_{k_3'k_3}\delta_{l'l} \qquad (30.8)$$

مع العلم أن $k_3 = 2\pi n_3/L$, $n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$, $l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ هو العدد المدارى الذى يختص بمسقط العزم الكلى على المحور z ، أى على اتجاه الحقل المغناطيسى ، ولعل من المناسب أن نكتب العناصر المصفوفية f للقسم القطرى من التابع الموجى بالشكل التالى :

$$f = \begin{pmatrix} f_1 e^{-i\varphi/2} \\ f_2 e^{i\varphi/2} \\ f_3 e^{-i\varphi/2} \\ f_4 e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \qquad (30.9)$$

وعند الانتقال إلى مجموعة الاحداثيات الاسطوانية $(x = r\cos\varphi,\ y = r\sin\varphi, z)$ يتحول مؤثر الاندفاع الحركى إلى الشكل :

$$\begin{aligned} P_x \pm iP_y &= -i\hbar e^{\pm i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial r} \pm \frac{i}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} \mp \gamma r\right] \\ P_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}, \quad \gamma = \frac{e_0\mathcal{H}}{2c\hbar} \end{aligned} \qquad (30.10)$$

وثم من المناسب فرض متحول جديد عديم الأبعاد $\rho = \gamma r^2$ ، وعندئذ تأخذ مجموعة المعادلات اللازمة لحساب مركبات f الشكل التالى :

$$\begin{aligned} (\varepsilon K \mp k_0) f_{1,3} + iR_2 f_{4,2} - k_3 f_{3,1} &= 0 \\ (\varepsilon K \mp k_0) f_{2,4} + iR_1 f_{3,1} + k_3 f_{4,2} &= 0 \end{aligned} \qquad (30.11)$$

حيث تقابل الإشارة العليا الدليل الأول الموضوع بجانب التابع f وتقابل الإشارة السفلى الدليل الثانى ، أما المؤثران R_1 و R_2 فهما

$$R_1 = \sqrt{\gamma\rho}\left[2\frac{d}{d\rho} - 1 - \frac{l-1}{\rho}\right], \quad R_2 = \sqrt{\gamma\rho}\left[2\frac{d}{d\rho} + 1 + \frac{l}{\rho}\right] \quad (30.12)$$

وبتربيع (30.11) أى بحذف مركبتى التابع الموجى $f_{1,3}$ أو $f_{2,4}$ بالتالى نحصل على مجموعة من معادلات من المرتبة الثانية :

$$\begin{aligned} &\left\{\rho\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{d}{d\rho} + \lambda - \frac{l}{2} - \frac{\rho}{4} - \frac{(l-1)^2}{4\rho}\right\} f_{1,3} = 0 \\ &\left\{\rho\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{d}{d\rho} + \lambda - \frac{l-1}{2} - \frac{\rho}{4} - \frac{l^2}{4\rho}\right\} f_{4,2} = 0 \end{aligned} \quad (30.13)$$

مع العلم أن :

$$\lambda = \frac{K^2 - k_0^2 - k_3^2}{4\gamma}$$

ويوجد تشابه تام فى حل هاتين المعادلتين . ولنأخذ المعادلة الثانية من (30.13) ، ولنأخذ بعين الاعتبار السلوك التقريبى للتابع الموجى فى مبدأ الاحداثيات

$$f \to f_0 = \rho^{l/2} \quad (30.14)$$

وفى اللانهاية ($\rho \to \infty$) :

$$f \to f_\infty = e^{-\rho/2} \quad (30.15)$$

ثم بالانتقال إلى التابع الموجى $u(\rho)$ ، حسب العلاقة :

$$f = f_0 f_\infty u = e^{-\rho/2}\rho^{l/2}u(\rho) \quad (30.16)$$

نجد أن $u(\rho)$ يكون حلا للمعادلة التفاضلية التالية :

$$\rho u'' + (l + 1 - \rho)u' + (\lambda - l)u = 0$$

وهذا الحل سيعطى كما هو معروف بالتابع المتسامى المنطبق التالى :

$$u = \Phi\{-(\lambda - l),\ l + 1,\ \rho\} \quad (30.17)$$

ومن الضرورى قطع السلسلة المتسامية كما فعلنا فى حالة الذرات الشبيهة بالهيدروجين ، وذلك من أجل الحلول المتناقصة عندما $\rho \to \infty$ وهذا يتحقق إذا كان $s = \lambda - l$ حيث $s = 0, 1, 2, \ldots$ هو العدد الكوانتى القطرى ولهذا يأخذ الوسيط λ قيما صحيحة $\lambda = s + l = n = 0, 1, 2, \ldots$ حيث n هو العدد الكوانتى الرئيسى أو الطاقوى ونحصل على طيف الطاقة بواسطة (30.13) ، حيث نجد أن :

$$K = \sqrt{k_0^2 + k_3^2 + 4\gamma n} \qquad (30.18)$$

مع العلم أن العدد الكوانتى n يقابل حركة الالكترون الدورية فى مستو متعامد مع الحقل المغناطيسى (سويات لانداو) ، أما hk_3 فهى القيمة الخاصة لمؤثر مسقط الاندفاع على اتجاه الحقل المغناطيسى (الحركة الحرة باتجاه الحقل) وان فرضية أن يكون الوسيط λ عددا صحيحا تحول التابع المتسامى إلى كثير حدود لاجير $Q_s^l(\rho)$ ، أى أن :

$$\Phi(-s, l+1, \rho) = \frac{l!}{(s+l)!} Q_s^l(\rho)$$

$$Q_s^l(\rho) = e^{\rho}\rho^{-l} \frac{d^s}{d\rho^s}(\rho^{s+l}e^{-\rho}) = \sum_{l=0}^{s} (-1)^{l+s} \frac{s!\,(s+l)!}{(s-j)!\,(s+l-j)!\,j} \rho^{s-l} \qquad (30.19)$$

فالتوابع الموجية للحركة القطرية يجب أن تتناسب مع تابع لاجير ، انظر (13.24) ، أى أن :

$$I_{n,s}(\rho) = \frac{1}{\sqrt{n!\,s!}} e^{-\rho/2} \rho^{\frac{n-s}{2}} Q_s^{n-s}(\rho) \qquad (30.20)$$

ولنعود الآن إلى مجموعة المعادلات (30.11) ونأخذ بعين الاعتبار تأثير المؤثرين R_1 و R_2 التالى :

$$R_1 I_{n-1,s}(\rho) = -\sqrt{4n\gamma}\, I_{n,s}(\rho), \quad R_2 I_{n,s}(\rho) = \sqrt{4n\gamma}\, I_{n-1,s}(\rho) \qquad (30.21)$$

فنجد لحساب التابع القطرى $f(\rho)$ العبارة :

$$f=\sqrt{2\gamma}\begin{pmatrix} C_1 I_{n-1,s}(\rho)\, e^{-i\varphi/2} \\ iC_2 I_{n,s}(\rho)\, e^{i\varphi/2} \\ C_3 I_{n-1,s}(\rho)\, e^{-i\varphi/2} \\ iC_4 I_{n,s}(\rho)\, e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \qquad (30.22)$$

حيث يحقق C_μ المعادلات الجبرية التالية :

$$\begin{aligned} (\varepsilon K \mp k_0)\, C_{1,3} - \sqrt{4n\gamma}\, C_{4,2} - k_3 C_{3,1} = 0 \\ (\varepsilon K \mp k_0)\, C_{2,4} - \sqrt{4n\gamma}\, C_{3,1} + k_3 C_{4,2} = 0 \end{aligned} \qquad (30.23)$$

ومن شرط معايرة نجد القسم القطرى :

$$\int_0^\infty r\, dr\, f^+ f = 1 \qquad (30.24)$$

وباعتبار صحة المساواة :

$$\int_0^\infty I_{ns}^2(\rho)\, d\rho = 1 \qquad (30.25)$$

فإننا نجد :

$$\sum_{\mu=1}^{4} C_\mu^* C_\mu = 1 \qquad (30.26)$$

ب) **الحالات المغزلية** . نلاحظ أن التابع الموجى ψ الذى حصلنا عليه هو التابع الخاص لمؤثر الطاقة

$$\mathbf{H}\psi = \varepsilon E \psi \qquad (30.27)$$

ولمؤثر مسقط الاندفاع على اتجاه الحقل المغناطيسى :

$$\mathbf{p}_z \psi_z = \hbar k_3 \psi \qquad (30.28)$$

وهو تابع خاص أيضا لمؤثر مسقط العزم الكلى على اتجاه الحقل المغناطيسى

$$\mathbf{J}_z \psi = \hbar\left(l - \frac{1}{2}\right)\psi \qquad (30.29)$$

ويتبادل المؤثران p_z و J_z مع بعضهما كما يتبادل كلا منهما مع الهاملتونيان H ولذلك يكون لهما تابع مشترك مع الهاملتونيان وتكون المقادير الميكانيكية المقابلة لهذه المؤثرات تكاملات للحركة؛ومن الضرورى لتعيين الحالة الكوانتية لجسيمات فيرمى تعيينا تاما فرض مؤثر رابع يميز الخواص المغزلية للالكترون ، ويجب أن يكون لمؤثر مسقط المغزل ـ مؤثر الاستقطاب ـ صفات « كوفاريانتية » وان يكون تكاملا للحركة ، وفى هذه الحالة وحدها يكون له توابع خاصة مشتركة مع الهاملتونيان ، هذا وتعتبر مسألة اختيار مؤثر الاستقطاب ذات أهمية خاصة عند دراسة الجسيم المتحرك فى حقل مغناطيسى (لا يكون الجسيم حرا) ، وفى مثالنا هذا توصف الخواص المغزلية بعدة طرائق :

١ ـ بفرض أن متجه المغزل ثلاثى الأبعاد

$$\sigma^0 = \rho_3\sigma + c\rho_1 \frac{\mathbf{P}}{E} - \frac{c^2\rho_3 (\sigma\mathbf{P})\,\mathbf{P}}{E\,(E + m_0c^2)} \qquad (30.30)$$

وليس هذا المقدار « كوفاريانتيا » (لا يوجد له مركبة رابعة) ولكن المسقط σ^0 على الحقل H يكون تكاملا للحركة وبحكم ذلك يمكن اختيار σ_3^0 بمثابة مؤثر الاستقطاب .

٢ ـ يفرض مؤثر استقطاب رباعى الأبعاد (بارغمان ـ فيغنر) ، أى أن :

$$S_\mu = (\mathbf{S},\ iS_t)$$

$$\mathbf{S} = \rho_3\sigma + \rho_1 \frac{\mathbf{P}}{m_0c}, \quad S_t = \frac{(\sigma\mathbf{P})}{m_0c} \qquad (30.31)$$

وتكون المركبة الرابعة لهذا المتجه الرباعى تكاملا للحركة فى الحقل المغناطيسى وهى تصف حالة الاستقطاب الطولانى أى مسقط المغزل على الاندفاع الحركى (اتجاه* سرعة الجسيم) كما أن مسقط المغزل على اتجاه الحقل (أى المركبة S_3) يكون تكاملا للحركة أيضا .

---

* نلاحظ أن حالة الاستقطاب الطولانى للالكترون المتحرك فى حقل مغناطيسى تصبح غير راسخة بسبب العزم الشاذ (الفراغى) المغناطيسى للالكترون .

٣ ـ بواسطة تنزور (رتل) الاستقطاب ، أى أن :

$$\begin{pmatrix} M_{23} & M_{31} & M_{12} \\ M_{41} & M_{42} & M_{43} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 \\ i\varepsilon_1 & i\varepsilon_2 & i\varepsilon_3 \end{pmatrix} \qquad (30.32)$$

حيث

$$\mu = \sigma + \rho_2 \frac{[\sigma P]}{m_0 c}, \quad \varepsilon = \rho_3 \frac{[\sigma P]}{m_0 c} \qquad (30.33)$$

هما المركبتان الفراغية والزمنية للارتال ، وعندما يتحرك الالكترون فى حقل مغناطيسى ثابت متجانس تصبح المركبة μ_3 (مسقط المغزل على اتجاه الحقل المغناطيسى) تكاملا للحركة ويصف المؤثر عندئذ حالة الاستقطاب العرضى (إن لم توجد حركة باتجاه الحقل) ، ويجب ملاحظة أن جميع هذه المؤثرات $\sigma_3^0, S_3, S_\rho, \mu_3$ فى التقريب اللانسبى تتحول إلى مؤثر باولى العادى للعزم المغناطيسى ، وبالتالى يكون لها تفسير واضح وبسيط جدا . ولا يوجد مثل هذا التفسير البسيط فى الحالة العامة لحركة الالكترون النسبية ويعود السبب فى ذلك إلى عدم امكانية فصل الحركتين المغزلية والمدارية للالكترون عندما تكون طاقته كبيرة . ولهذا إذا أردنا فصل معادلة ديراك بالحالات المغزلية فإننا سنستفيد من مؤثر رتل الاستقطاب الذى تتبادل مركبته μ_3 مع الهاملتونيان ويخضع التابع الموجى عندئذ للمعادلة الاضافية التالية :

$$\mu_3\psi = \frac{K_0}{k_0}\zeta\psi, \quad K_0 = \sqrt{K^2 - k_3^2}, \quad \zeta = \pm 1 \qquad (30.34)$$

فعندما تأخذ ζ القيمة $\zeta = 1$ يكون اتجاه مغزل الالكترون باتجاه الحقل المغناطيسى أما عندما $\zeta = -1$ فيكون اتجاه المغزل بعكس اتجاه الحقل المغناطيسى ، وطبقا لـ (30.34) نجد مجموعة معادلات لحساب المعاملات C_μ ، انظر (30.22) ، أى أن :

$$\begin{aligned} (\varepsilon K \mp \zeta K_0) C_{1,3} &= k_3 C_{3,1} \\ (\varepsilon K \pm \zeta K_0) C_{2,4} &= -k_3 C_{4,2} \end{aligned} \qquad (30.35)$$

ومن الضرورى حل هذه المجموعة بالاشتراك مع المجموعة (30.23) ، وان حل هذه المعادلات يؤدى إلى النتيجة التالية :

$$\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} B_3 (A_3 + A_4) \\ B_4 (A_4 - A_3) \\ B_3 (A_3 - A_4) \\ B_4 (A_4 + A_3) \end{pmatrix} \qquad (30.36)$$

حيث

$$\begin{aligned} A_3 &= \sqrt{1 + \varepsilon k_3/K}, \quad A_4 = \varepsilon\zeta \sqrt{1 - \varepsilon k_3/K} \\ B_3 &= \sqrt{1 + \zeta k_0/K_0}, \quad B_4 = \zeta \sqrt{1 - \zeta k_0/K_0} \end{aligned} \qquad (30.37)$$

وهكذا حصلنا على الحل العام لمعادلة ديراك للالكترون المتحرك فى حقل مغناطيسى ثابت ومتجانس وقد انفصل هذا الحل إلى عدة أقسام يوافق كل منها احدى حالات الاستقطاب للالكترون ، أى أن :

$$\Psi_{nsk_3,\zeta}(r, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon Et} \frac{e^{ik_3 z}}{\sqrt{L}} \frac{e^{i(l-1/2)\varphi}}{\sqrt{2\pi}} f \qquad (30.38)$$

جـ) طيف الطاقة . المعنى الفيزيائى للعدد الكوانتى القطرى . يبدو أن طيف طاقة الالكترون فى الحركة النسبية يتبع بشكل غير خطى شدة الحقل المغناطيسى ، انظر (30.18) ، ويتعين بالعدد الرئيسى أو الطاقـوى $n = l + s$ ، أى أن :

$$K = E/c\hbar = \sqrt{k_0^2 + k_3^2 + 4\gamma n} \qquad (30.39)$$

ويصبح الطيف متساوى البعد فى التقريب اللانسبى

$$E \simeq m_0 c^2 + \frac{p_3^2}{2m_0} + n\hbar\Omega \qquad (30.40)$$

حيث $\Omega = e_0 \mathcal{H} / m_0 c$ هى التواتر السيكلوترونى ، ونلاحظ أن لطيف طاقة الالكترون انطباقا بالعدد الكوانتى القطرى ... ,$s = 0, 1, 2$ ويعود سبب هذا الانطباق إلى أنه عندما تعطى طاقة معينة للحركة فى حقل مغناطيسى فيمكن أن يكون نصف قطر المدار ثابتا ولكن مركزه لا يكون

كذلك ، ويمكن حساب نصف القطر إذا استفدنا من العلاقة المعروفة لنصف القطر الكلاسيكى :

$$\beta E = e_0 \mathscr{H} R \quad (30.41)$$

ثم إذا فرضنا أن الحركة تحدث فى مستوى مسار الدوران ($k_3 = 0$) وقارنا هذه العلاقة مع (30.39) نجد أن :

$$R = \sqrt{\frac{n}{\gamma}} \quad (30.42)$$

وهكذا يتعين نصف قطر الدوران شبه الكلاسيكى بمعرفة العدد الكوانتى الرئيسى n ، وإذا كان المسار دائرة مركزها يبعد عن مركز الاحداثيات بمقدار a فإن متوسط مربع نصف القطر يساوى :

$$\overline{r^2_{\text{cl}}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \, (R^2 + a^2 - 2aR \cos \varphi) = R^2 + a^2 \quad (30.43)$$

ولنحسب هذا المقدار طبقا للنظرية الكوانتية فنجد أن

$$\langle r^2 \rangle_{\text{qu}} = \sum_{\zeta} \int r^2 \psi^+_{nsk_3\zeta} \psi_{nsk_3\zeta} d^3x = \frac{n + s + 1/2}{\gamma} \quad (30.44)$$

ومنه نجد أن العدد الكوانتى s يميز المسافة بين مركز الاحداثيات ومركز المسار الدائرى ، أى أن :

$$a \simeq \sqrt{\frac{s}{\gamma}} \quad (30.45)$$

وعليه يمكن اعتبار حركة شحنة فى حقل مغناطيسى (بفرض أن كلا من n و s لهذه الشحنة معلومان) بمثابة مدارات دائرية مرتبة قطرها متساوى ($n = \text{const}$) إلا أن مراكزها مختلفة وتقع على أبعاد a من مركز الاحداثيات ($s = 0, 1, 2, \ldots$) ولكى نفهم طبيعة الاهتزازات لنصف القطر على ضوء النظرية الكوانتية نعرّف التأرجح التربيعى لهذا المقدار ، طبقا للقواعد العامة لذلك ، فنجد أن :

$$\bar{\xi}^2=\sum_{\zeta}\int (r-\langle r\rangle_{qu})^2\,\psi^{+}_{nsk_3\zeta}\psi_{nsk_3\zeta}\,d^3x=\langle r^2\rangle_{qu}-\langle r\rangle^2_{qu}\simeq\frac{s}{2\gamma} \quad (30.46)$$

حيث استخدمت هذه العلاقة :

$$\langle r\rangle_{qu}=\sum_{\zeta}\int r\psi^{+}_{nsk_3\zeta}\psi_{nsk_3\zeta}\,d^3x\simeq\sqrt{\frac{n}{\gamma}}\left(1+\frac{s+{}^1\!/_2}{4n}\right) \quad (30.47)$$

وفرضنا أن للحركة طبيعية ماكروسكوبية ($n >> 1$) وان اهتزازات المركز ضئيلة بما فيه الكفاية (تأرجح نصف القطر) ($n >> s$) .

د) النظرية الكوانتية للاشعاع السينكروتروني*. الظواهر الاستقطابية.

سندرس تفاعل الكترون يتحرك فى حقل مغناطيسى ، مع حقل فوتونات كوانتى مكمم ، وفى هذه الحالة تخضع الالكترونات لمعادلة ديراك ذات الهاملتونيان (30.3) بحيث يكون :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H_0\psi,\quad H_0=c\,(\alpha P)+\rho_3 m_0c^2 \quad (30.48)$$

ويمكن تمثيل حقل الفوتونات المغناطيسى بشكل أمواج مستوية ، أما طاقة تفاعل الالكترون التى يجب أن تضاف إلى (30.48) فهى u بحيث يكون :

$$H=H_0+u,\ u=u^{+}+u^{-}$$

حيث :

$$u^{-}=\frac{e_0}{L^{3/2}}\sum_{\varkappa}\sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{\varkappa}}\,(\alpha a)\,e^{-ic\varkappa t+i\varkappa r}$$

$$u^{+}=\frac{e_0}{L^{3/2}}\sum_{\varkappa}\sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{\varkappa}}\,(\alpha a^{+})\,e^{ic\varkappa t-i\varkappa r} \quad (30.49)$$

وهنا يكون مؤثر خلق a^+ وفناء a الفوتونات بمثابة سعات متجه الكمون ، ولنأخذ الآن حالتين كوانتيتين a و b ($E_b > E_a$) وتحسب طبقا للطرائق العامة لنظرية الاضطراب غير الراسخة احتمال الانتقال الكوانتى ($a \to b$) فى وحدة W_{ba} الزمن فنجد أن :

* يقصد بكلمة الإشعاع ، فى هذا البند ، الاشعاع السينكروترونى . (المراجع) .

$$w_{ba} = \frac{e_0^2}{2\pi\hbar} \int \frac{d^3\varkappa}{\varkappa} \delta(\varkappa - \varkappa_{ba}) \Phi \qquad (30.50)$$

حيث :

$$\Phi = (\overline{\alpha^*}\,\overline{\alpha}) - (\varkappa^0 \overline{\alpha^*})(\varkappa^0 \overline{\alpha}) \qquad (30.51)$$

وحيث فرضنا أن $\varkappa^0 = \varkappa/|\varkappa|$ هو متجه الوحدة فى اتجاه انتشار الفوتون ، أما المقدار $c\hbar\,\varkappa_{ba} = E_b - E_a$ فيختص بتغيير E للالكترون (تعتبر الانتقالات تلقائية) ويساوى العنصر المصفوفى لمصفوفة ديراك α فى (30.51) إلى :

$$\overline{\alpha} = \int \psi_a^+ \alpha e^{-i\varkappa r} \psi_b d^3x \qquad (30.52)$$

وبما أن طاقة الفوتون الصادر تتناسب مع التواتر ($\varepsilon = c\hbar\,\varkappa$) فإننا نحصل بواسطة (30.50) على الصيغة التى تعطى كثافة الاشعاع وذلك بعد الجمع بكل الحالات النهائية للالكترون ، أى أن :

$$W = \sum_b c\hbar\varkappa_{ba} w_{ba} = \frac{ce_0^2}{2\pi} \sum_b \int d^3\varkappa \delta(\varkappa - \varkappa_{ba}) \Phi. \qquad (30.53)$$

ولنوضح كيف يمكن أن تؤخذ الخواص الاستقطابية للاشعاع بعين الاعتبار ، ولهذا من الضرورى تمثيل سعة متجه الكمون a للفوتونات المستقطبة خطيا بشكل مجموع مركبتين متعامدتين :

$$a = \beta_2 q_2 + \beta_3 q_3 \qquad (30.54)$$

حيث يختلف عن الصفر التركيب التربيعى للسعات المكممة ثانية

$$q_s q_{s'}^+ = \delta_{ss'}, \quad (s, s' = 2, 3) \qquad (30.55)$$

أما β_2 و β_3 فهما متجها وحدة ، اختياريان ومتعامدان مع بعضهما ومع اتجاه متجه اندفاع الفوتون $\varkappa$

$$\beta_3 = [\varkappa^0 \beta_2], \quad (\varkappa^0 \beta_\lambda) = (\beta_2 \beta_3) = 0 \quad (\lambda = 2, 3) \qquad (30.56)$$

وبحكم هذه العلاقات نكتب β_2 و β_3 بالشكل التالى :

$$\beta_2 = \frac{[\varkappa^0 j^0]}{\sqrt{1-(\varkappa^0 j^0)^2}}, \quad \beta_3 = \frac{\varkappa^0 (\varkappa^0 j^0) - j^0}{\sqrt{1-(\varkappa^0 j^0)^2}} \qquad (30.57)$$

حيث j^0 هو اتجاه معزول فى الفراغ (j^0 متجه وحدة) . ومن الطبيعى أن نعتبر فى مسألتنا المتعلقة باشعاع شحنة متحركة فى جقل مغناطيسى أن الاتجاه المدروس مطابق لاتجاه الحقل* . فإذا أردنا الآن أن نأخذ بعين الاعتبار استقطاب الفوتونات فى شدة الاشعاع (30.53) فمن الضرورى أن نكتب :

$$W_l = \frac{ce_0^2}{2\pi} \sum_b \int d^3\varkappa \delta(\varkappa - \varkappa_{ba}) \Phi_l \qquad (30.58)$$

حيث تتبع Φ_l نوع الاستقطاب وبصورة خاصة نجد فى حالة الاستقطاب الخطى :

$$\Phi_\lambda = (\overline{a^*}\beta_\lambda)(\overline{a}\beta_\lambda) \qquad (30.59)$$

وهنا $\lambda = 2$ توافق W_2 أى ما يسمى بالمركبة σ للاشعاع وهى الحالة التى يقع فيها المتجه الكهربائى لحقل الاشعاع فى مستوى مسار الدوران ويتجه إلى مركز المسار ، أما $\lambda = 3$ فتوافق المركبة π للاشعاع ، حيث يتجه المتجه الكهربائى لحقل الاشعاع باتجاه الحقل الخارجى (الشكل ٣٠ ـ ١)

---

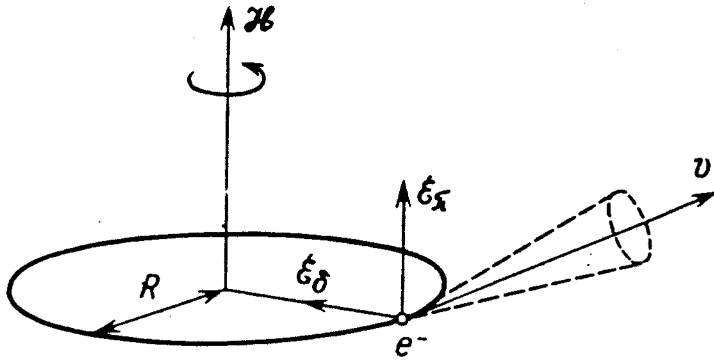
* من المناسب عند دراسة الاستقطاب الدائرى للسعة الفوتونية a أن نفصلها إلى مركبتين :

$$a = \beta_l q_l + \beta_{-l} q_{-l}$$

مع العلم أن التركيبات التربيعية $q_l q_{l'}^{+} = \delta_{ll'}$ هى التى تختلف عن الصفر أما متجها الوحدة β_2 و β_3 فيرتبطان مع β_l بالعلاقة :

$$\beta_l = \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta_2 + il\beta_3)$$

حيث $l = 1$ تقابل الاستقطاب اليمينى و $l = -1$ تقابل الاستقطاب اليسارى .



الشكل ٣٠ ـ ١ . الاشعاع السينكروترونى

وعندما يكون الاستقطاب دائريا ($l \pm 1$ توافق الاستقطاب اليمينى واليسارى) فإننا نجد :

$$\Phi_l = (\overline{\alpha}^* \beta_l^*)(\overline{\alpha}\beta_l) = \frac{1}{2}\left\{[\varkappa^0\overline{\alpha}^*][\varkappa^0\overline{\alpha}] - \frac{l}{2} i\,(\varkappa^0[\,\overline{\alpha}^*\overline{\alpha}\,])\right\} \qquad (30.60)$$

ومن الواضح أن المقدار Φ الذى يمثل شدة الاشعاع الكلية (بعد الجمع بحالتى الاستقطاب) ، انظر (30.53) ، يساوى :

$$\Phi = \Phi_2 + \Phi_3 = \Phi_1 + \Phi_{-1} \qquad (30.61)$$

ان النتائج التى حصلنا عليها لكل من احتمال الانتقال الكوانتى وكثافة الاشعاع هى نتائج عامة ، ولندرس الآن مسألة الاشعاع ، أى عندما تتعين كل من الحالة الابتدائية $E_a(\psi_{nsk_{3\zeta}})$ والحالة النهائية $E_b(\psi_{n's'k'_{3\zeta}})$ بشكل حل دقيق لمعادلة ديراك للالكترون المتحرك فى حقل مغناطيسى ثابت ومتجانس ، انظر (30.22) و (30.36) - (30.38) ، وعندئذ يسهل حساب العنصر المصفوفى فى مصفوفة ديراك α (30.52) بالشكل التالى :

$$\overline{\alpha} = \int \psi^+_{n's'k'_{3\zeta}} e^{-i\varkappa r} \alpha \psi_{nsk_{3\zeta}} \, d^3x \qquad (30.62)$$

وباستعمال الاحداثيات الكروية للمتجه $\varkappa$ ، أى أن :

$$\varkappa_1 = \varkappa \sin\theta \cos\varphi', \quad \varkappa_2 = \varkappa \sin\theta \sin\varphi', \quad \varkappa_3 = \varkappa \cos\theta \qquad (30.63)$$

نرى أنه لا يمكن أن تتعلق شدة الاشعاع بالزاوية φ' بسبب التناظر المحورى للحقل المغناطيسى الخارجى ولهذا يمكن وضع هذه الزاوية بالشكل الذى نريده مع العلم أن هذا لا يغير فى شىء من الحالة العامة ، فلنفرض $\varphi' = \pi / 2$ وعندئذ نجد أن :

$$\varkappa_1^0 = 0, \quad \varkappa_2^0 = \sin\theta, \quad \varkappa_3^0 = \cos\theta \qquad (30.64)$$

أما بالنسبة لـ Φ_i فنحصل ، انظر (30.59) ، على ما يلى :

$$\Phi_2 = \bar{\alpha}_1^{*} \bar{\alpha}_1 \qquad (30.65)$$

$$\Phi_3 = (\bar{\alpha}_2 \cos\theta - \bar{\alpha}_3 \sin\theta)^2 \qquad (30.66)$$

$$\Phi_l = \frac{1}{2} (\Phi_2 + \Phi_3 - il\Phi_4) \qquad (30.67)$$

$$\Phi_4 = (\bar{\alpha}_1^{*} \bar{\alpha}_2 - \bar{\alpha}_2^{*} \bar{\alpha}_1) \cos\theta - (\bar{\alpha}_1^{*} \bar{\alpha}_3 - \bar{\alpha}_3^{*} \bar{\alpha}_1) \sin\theta \qquad (30.68)$$

وتعتبر هذه العلاقات أساسا لنظرية الاشعاع. ولنحسب الآن احتمال الانتقال وكثافة الاشعاع دون اهمال استقطاب الفوتونات ، فمن السهل حساب العنصر المصفوفى لمصفوفة ديراك (30.62) إذا فرضنا أنه لم تكن للالكترون فى الحالة الابتدائية حركة على طول الحقل ($k_3 = 0$) حيث نجد أن :

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \exp[-iz(k_3' + \varkappa\cos\theta)]\, dz \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} r\, dr \times$$
$$\times \exp[-i\varkappa r \sin\theta \sin\varphi + i(l - l')\varphi] f'^{+} \alpha f \qquad (30.69)$$

حيث θ الزاوية التى يصنعها $\varkappa$ مع المحور z و φ الزاوية القطبية فى مجموعة الاحداثيات الاسطوانية للالكترون ، ولنستخدم الآن العلاقتين :

$$\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} dz \exp[-iz(k_3' + \varkappa\cos\theta)] = \delta_{k_3', -\varkappa\cos\theta} \qquad (30.70)$$

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi \exp[-i\varkappa r\sin\theta\sin\varphi + i(l-l')\varphi] = J_{l-l'}(\varkappa r\sin\theta) \qquad (30.71)$$

حيث δ رمز كرونيكر - فايرشتراس و $J_{l-l'}$ هو تابع بيسل ، ونكتب تكامل تابع لاجير $I_{ns}(\rho)$ (30.20) التالى :

$$\int_0^{\infty} J_{l-l'}(2\sqrt{x\rho}) I_{ns}(\rho) I_{n's'}(\rho) d\rho = I_{nn'}(x) I_{ss'}(x) \qquad (30.72)$$

حيث $n' = l' + s',\ n = l + s,\ x = \varkappa^2 \frac{\sin^2\theta}{4\gamma}$

وأخيرا إذا جمعنا بالدليل k_3' فإننا نحصل على العناصر المصفوفيـة التالية :

$$\left.\begin{matrix} -i\bar{\alpha}_1 \\ \bar{\alpha}_2 \end{matrix}\right\} = \frac{1}{4}(A_3'A_4 + A_4'A_3)(B_3'B_4 I_{n,n'-1}(x) \mp$$
$$\mp B_4'B_3 I_{n-1,n'}(x)) I_{ss'}(x)$$

$$\bar{\alpha}_3 = \frac{1}{4}(A_3'A_3 - A_4'A_4)(B_3'B_3 I_{n-1,n'-1}(x) +$$
$$+ B_4'B_4 I_{nn'}(x)) I_{ss'}(x) \qquad (30.73)$$

حيث تعطى المعاملات المغزلية للحالة الابتدائية (A, B) والنهائية (A', B') بالعلاقات (30.73) ، وسنفرض أن الطاقة موجبة دوما ونضع $\varepsilon = \varepsilon' = 1$ أما المحول x فى تابع لاجير الموجود فى (30.73) فيتبع تواتر الفوتون $\omega = c\varkappa$ حسب العلاقة :

$$x = \frac{\varkappa^2 \sin^2\theta}{4\gamma} \qquad (30.74)$$

فإذا فرضنا أن حركة الالكترون تحدث فى اللحظة الابتدائية (قبل الاشعاع)

فى مستوى مسار الدوران أى $k_3 = 0$ فإننا نحصل على العبارات الدقيقة لحساب المعاملات (30.37) بالشكل البسيط التالى :

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ A_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \zeta \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} A'_3 \\ A'_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \zeta' \end{pmatrix} \sqrt{1 \mp \frac{\varkappa \cos\theta}{K'}}$$

$$\begin{pmatrix} B_3 \\ B_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \zeta \end{pmatrix} \sqrt{1 \pm \zeta\sqrt{\varepsilon_0}}, \quad \begin{pmatrix} B'_3 \\ B'_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \zeta' \end{pmatrix} \sqrt{1 \pm \zeta' \frac{\sqrt{\varepsilon_0}\ K}{\sqrt{K^2 - 4\gamma\nu}}} \qquad (30.75)$$

حيث $\varepsilon_0 = 1 - \beta^2,\ \beta = v/c$ ويمكن الحصول على شدة الاشعاع باجراء الجمع بـ $\nu = n - n'$ (الرقم التوافقى) ثم بـ s' و l' ، أى أن :

$$W = \sum_{i=2,3} W_i$$

$$W_i = \frac{ce_0^2}{2\pi} \sum_{\nu, s', l'} \int d^3\varkappa\delta\,(\varkappa - \varkappa_{nn'})\,\Phi_i \qquad (30.76)$$

حيث يعرّف كلا $c\varkappa_{nn'} = \frac{1}{\hbar}(E_n - E_{n'})$ و Φ_i بالعلاقتين (30.65) — (30.68) . هذا وتعتبر العلاقة المكتوبة آنفا دقيقة وتؤمن كليا دراسة كل مسائل النظرية الكوانتية للاشعاع دون أى تحديد لطاقة الالكترون .

هـ) صيغة شوت الكلاسيكية دون اهمال استقطاب الاشعاع .

لندرس النظرية الكلاسيكية للاشعاع المتواقت بغض النظر عن الظواهر الكوانتية ، فإذا فرضنا أن الالكترون يتحرك بمسار مرئى وان للجسيم طاقة كبيرة ($E >> m_0c^2$) فإننا نصادف حالة شبه كلاسيكية فى الميكانيكا الكوانتية وتتميز هذه الحالة بكبر الأعداد الكوانتية ولهذا نحسب أولا العلاقات التقريبية لتوابع لاجير $I_{nn'}(x)$ الموجودة فى مصفوفة ديراك α ، فمن

المعلوم أنه يمكن التعبير عن توابع لاجير فى الحالة الحدية للأعداد الكوانتية الكبيرة بدلالة توابع بيسل

$$\lim_{n\to\infty} I_{n,n-\nu}\left(\frac{x^2}{4n}\right) = J_\nu(x) \qquad (30.77)$$

التى تحقق العلاقات التكرارية التالية :

$$\begin{aligned} J_{\nu-1}(x) + J_{\nu+1}(x) &= \frac{2\nu}{x} J_\nu(x) \\ J_{\nu-1}(x) - J_{\nu+1}(x) &= 2J'_\nu(x) \end{aligned} \qquad (30.78)$$

وفى النظريةالكلاسيكية لا يؤثر قلب المغزل فى قوة الاشعاع لأن هذا الاسهام يتناسب مع $\hbar^2$ ولهذا يمكن أن نضع $\zeta = \zeta'$ فى كل الحسابات اللاحقة وعندئذ نحصل على مصفوفة ديراك التالية :

$$\left.\begin{array}{r} -i\bar{\alpha}_1 \\ \bar{\alpha}_2 \end{array}\right\} = \frac{1}{2}\beta\,(I_{n,n'-1} \mp I_{n-1,n'})\, I_{ss'} \qquad (30.79)$$

$$\bar{\alpha}_3 = 0$$

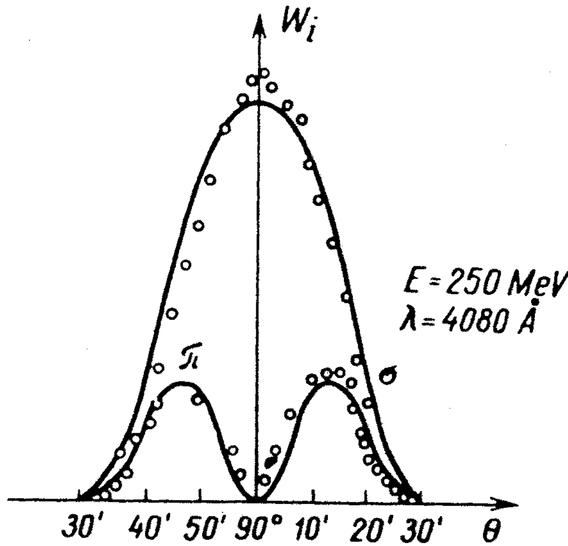
وكل هذه التوابع تتبع المتحول x المعرف بالعلاقة (30.74) ، ونعوض هذه العبارة فى (30.76) التى تعطى شدة الاشعاع وعندئذ إذا جمعنا بالنسبة للمغزل (أى إذا فرضنا $\zeta = \zeta'$) والعدد الكوانتى القطرى s' فإننا نجد :

$$\sum_{s'=0}^{\infty} I^2_{ss'}(x) = 1 \qquad (30.80)$$

ثم إذا انتقلنا إلى النهاية الكلاسيكية (30.77) فإننا نحصل على علاقة شوت المعممة التى لا تأخذ بعين الاعتبار الخواص الزاوية الطيفية فحسب وإنما الخواص الاستقطابية للاشعاع أيضا :

$$W^{cl}_{\sigma,\pi} = \frac{e^2\omega_0^2}{c} \sum_{\nu=1}^{\infty} \nu^2 \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\, \{l_\sigma \beta J'_\nu(\nu\beta\sin\theta) + l_\pi \operatorname{ctg}\theta\, J_\nu(\nu\beta\sin\theta)\}^2 \qquad (30.81)$$

حيث $\omega_0 = c\beta/R = e_0\mathcal{H}c/E$ تواتر دوران الالكترون على المسار وهو يرتبط مع تواتر الدوران بالعلاقة : $\omega = \nu\omega_0$ بشكل توافقي ($\nu = 1, 2, 3, \ldots$) . وإذا جعلنا $l_\sigma = 1, l_\pi = 0$ فى هذه العلاقة فإننا نحصل على شدة المركبة σ لاستقطاب الاشعاع الخطى الذى يتميز بأن متجه حقل إشعاعه الكهربائى يقع فى مستوى مدار الالكترون ويتجه تقريبا باتجاه المركز ، ويمكن الحصول على شدة مركبة الاستقطاب π الخطى للاشعاع إذا جعلنا $l_\sigma = 0$ و $l_\pi = 1$ فى (30.81) ، أما متجه الحقل الكهربائى للاشعاع المقابل لهذه المركبة فيتجه عمليا على طول الحقل المغناطيسى الخارجى (المحور z) وأما التوزع الزاوى لمركبات الاستقطاب الخطى فيبدو مختلفا جوهريا (الشكل ٣٠ ـ ٢) ، إذ أن للمركبة



الشكل ٣٠ ـ ٢ . المعطيات التجريبية والنظرية التى تميز الاستقطاب الخطى للاشعاع.

σ نهاية عظمى حادة فى مستوى المدار بينما تنعدم المركبة π فى هذا المستوى ، أما النهايتان العظميان للمركبة π فتكونان متساويتين إلى الأعلى والأسفل من المستوى $z = 0$ (وهو وضع المسار المتوازى للالكترون) ، ومن المناسب تحليل الخواص الطيفية والزاوية للاشعاع عن طريق تقريب تابع بيسل فى (30.81) لأن هذه العبارة بشكلها العام غير مناسبة لاجراء الحسابات ، إذ يوجد المقدار الكبير $\nu >> 1$ فى الدليل وفى متحول التابع $J_\nu(\nu\beta \sin\Theta)$ ، وقد برهن بطريقة .W.K.B عندما $(x - \nu - 0)$ أنه :

$$J_\nu(\nu\beta \sin\theta) = \frac{\varepsilon^{1/2}}{\pi\sqrt{3}} K_{1/3}\left(\frac{\nu}{3}\varepsilon^{3/2}\right)$$
$$J'_\nu(\nu\beta \sin\theta) = \frac{\varepsilon}{\pi\sqrt{3}} K_{2/3}\left(\frac{\nu}{3}\varepsilon^{3/2}\right) \qquad (30.82)$$

حيث k_μ تابع بيسل ذو الوسيط العقدى (تابع ماكدونالد) و $\varepsilon = 1 - \frac{x^2}{\nu^2}$ و $x = \nu\beta\sin\theta$ وقد أخذ المشتق J'_ν بكل المتحول ، وعندئذ يمكن كتابة (30.81) بشكل أنسب لمناقشتها ، وهو التالى :

$$W_{\sigma,\pi} = \frac{ce_0^2}{3\pi^2R^2}\sum_{\nu=1}^{\infty}\nu^2\int_0^\pi \sin\theta\, d\theta\left\{l_0\beta\varepsilon K_{2/3}\left(\frac{\nu}{3}\varepsilon^{3/2}\right) + \right.$$
$$\left. + l_\pi \operatorname{ctg}\theta\sqrt{\varepsilon}K_{1/3}\left(\frac{\nu}{3}\varepsilon^{3/2}\right)\right\}^2 \qquad (30.83)$$

وباستكمال هذه العبارة بالزاوية θ نحصل على :

$$W_{\sigma,\pi} = \int_0^\infty W_{\sigma,\pi}(y)\,dy \qquad (30.84)$$

حيث يكون لكل من التوزع الطيفى لمركبتى الاستقطاب σ و π الشكل التالى :

$$W_{\sigma,\pi}(y) = \frac{1}{2}W^{cl}\,\frac{9\sqrt{3}}{8\pi}\,y\left\{\int_y^\infty K_{5/3}(x)\,dx \pm K_{2/3}(y)\right\} \qquad (30.85)$$

وقد انتقلنا فى المساواة (30.83) من الجمع إلى التكامل (المجال الفعال للتوافقيات $\nu \gg 1$) $\sum_{\nu=1}^{\infty} \to \int_0^{\infty} d\nu$ ، هذا بالاضافة إلى أننا فرضنا

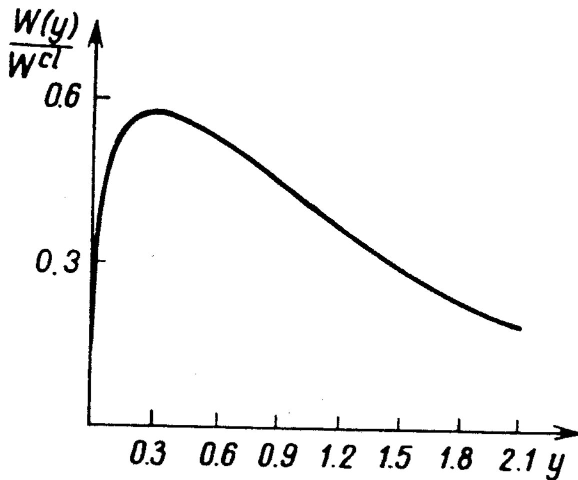
$$y = \frac{2}{3} \nu \varepsilon_0^{3/2} = \frac{2}{3} \frac{\omega}{\omega_0} \varepsilon_0^{3/2}, \quad \varepsilon_0 = 1 - \beta^2$$

وقد رمزنا بـ W^{cl} للشدة الكلية للاشعاع فى التقريب الكلاسيكى :

$$W^{cl} = \frac{2}{3} \frac{ce_0^2}{R^2} \left(\frac{E}{m_0c^2} \right)^4 \qquad (30.86)$$

وبجمع العبارات (30.85) نحصل على التوزع الطيفى لمجموع شدتى كل من المركبتين :

$$W(y) = W^{cl} \frac{9\sqrt{3}}{8\pi} y \int_y^{\infty} K_{5/3}(x)\, dx \qquad (30.87)$$



الشكل ٣٠ ـ ٣ . المنحنى العام الذى يبيّن علاقة شدة الاشعاع بالتواتر .

ويمثل الشكل ٣٠ ـ ٣ منحنى التوزع الطيفى بدلالة y ، ومن الملاحظ ان لهذا التوزع نهاية عظمى عندما $y \sim 1$ (بالضبط عندما $y \approx 0{,}3$) وهذا ما يوافق أن تواتر الاشعاع ω_{max} يساوى :

$$\omega_{max} \approx 0{,}5 \frac{c}{R} \left(\frac{E}{m_0c^2} \right)^3$$

وفى الحالة فوق النسبية $E >> m_0 c^2$ يتألف الاشعاع بصورة رئيسية من توافقيات ν عالية جدا ومن التواتر $\omega_0 = c/R$ وهى من رتبة $\nu \sim (E / m_0 c^2)^3$ (وهذا يؤكد صحة الانتقال الذى فعلناه منذ قليل) من التوزع بالتوافقيات المتقطعة إلى التوزع المستمر بالتواترات ω ثم إلى التكامل بالمتحول الذى يساوى :

$$y = \frac{2}{3} (\omega/\omega_0) (m_0 c^2/E)^3$$

وإذا استكملنا (30.85) بالطيف ، أى بالمتحول y نجد أن :

$$W_\sigma = \frac{7}{8} W^{cl}, \quad W_\pi = \frac{1}{8} W^{cl} \qquad (30.88)$$

عدا عن ذلك أن للاشعاع استقطابا خطيا قويا ، وأن للخواص الاستقطابية للاشعاع أهمية خاصة ، لأن الاستقطاب الذى يشكل أحد المعالم الرئيسية للاشعاع يمكن أن يستخدم فى الدراسة التجريبية للاشعاع* الوارد إلينا من المجرات . ولقد اقتصرنا فى حساباتنا على التقريب الكلاسيكى مع العلم أن النظرية التى ذكرناها هنا تؤمن حساب شدة الاشعاع فى الحالة الكوانتية ، ونشير هنا دون التعمق فى ذلك إلى أنه فى النظرية الكوانتية يلعب دورا هاما الوسيطان :

$$\xi = \frac{3}{2} \frac{\mathcal{H}}{\mathcal{H}_0} \frac{E}{m_0 c^2} = \left(\frac{E}{E_{1/2}} \right)^2$$
$$f = \frac{\mathcal{H}}{\mathcal{H}_0} \qquad (30.88)$$

حيث $\mathcal{H}_0 = m_0^2 c^3 / \hbar e_0 = 4{,}41 \cdot 10^{13} Gs$ وهو ما يسمى بحقل شرودينجر المغناطيسى أما القيمة الحرجة للطاقة $E_{1/2}$ فتساوى :

$$E_{1/2} = m_0 c^2 \left(\frac{2}{3} \frac{m_0 c R}{\hbar} \right)^{1/2} \qquad (30.89)$$

* لقد تمكن كروليف وكوليكوف فى تجاربهما من التحقق من الصيغ النظرية المميزة لاستقطاب الاشعاع .

وإذا كان $\xi \ll 1$ أى $E \ll E_{1/2}$ و $\mathcal{H} \ll \mathcal{H}_0$ (الطاقة والحقل أصغر بكثير من المقادير الحرجة .) فإن الظواهر الكوانتية تبدو بشكل تصحيحات صغيرة على شدة الاشعاع الكلاسيكية ، وبما أن الالكترون هو جسيم فوق نسبى $(E \gg m_0c^2)$ فسيكون الوسيط f صغيرا بالمقارنة مع ξ ($f << \xi$) وفى هذه الحالة تبدو الظواهر الكوانتية فى حدود النشر بـ ξ متناسبة مع $\hbar$ ، وبصورة خاصة إذا اقتصرنا على الحدود الخطية بـ ξ فإننا نجد :

$$W_{\zeta}^{qu} = W^{cl}\left\{1 - \left(\frac{55\sqrt{3}}{24} + \zeta\right)\xi + \dots\right\} \qquad (30.90)$$

حيث $\zeta = \pm 1$ تميز الاستقطاب العرضانى للالكترونات و ξ الوسيط الكوانتى (30.88) وإذا كانت امكانيات الاستقطاب متساوية بالنسبة للالكترون فإننا نحصل للوسيط (30.90) على ما يلى :

$$W^{qu} = \frac{1}{2}(W_1 + W_{-1}) = W^{cl}\left\{1 - \frac{55\sqrt{3}}{16}\frac{\hbar}{m_0cR}\left(\frac{E}{m_0c^2}\right)^2 + \dots\right\} \qquad (30.91)$$

ويبدو من هذه النتائج أن النظرية الكلاسيكية للاشعاع السريع تبقى صحيحة حتى قيم الطاقة $E \sim E_{1/2}$ وهذا ما يحدث عندما $\mathcal{H} \sim 10^4\ Gs$ حيث يكون $E_{1/2} = 10^{13}\text{eV}$ ولهذا الحد تفسير فيزيائى واضح وهو أن النظرية الكلاسيكية تبقى مناسبة طالما أن طاقة الفوتون الصادر أصغر من طاقة الالكترون :

$$E_{ph} = \hbar\nu\omega_0 \sim \hbar\omega_0\left(\frac{E}{m_0c^2}\right)^3 \ll E \qquad (30.92)$$

ومنه تنتج القيمة الحرجة للطاقة التى تتحقق بالعلاقة :

$$E << E_{1/2}$$

وقد حصلنا على هذه النتائج بفرض أن الأعداد الكوانتية قبل وبعد الاشعاع تبقى كبيرة $n >> 1,\ n' >> 1$ (الحركة شبه كلاسيكية) وبشرط أن

تكون شدة الحقل $\mathcal{H}$ صغيرة بالنسبة للقيمة الحرجة $\mathcal{H}_0$ $(f \ll 1)$ ، وتعتبر الطرائق المستخدمة فى هذه الحالة مغلقة وتصف العلاقات التى حصلنا عليها لطيف الاشعاع كله لأن طاقة الالكترون تفرض نسبية أيضا بعد الاشعاع $(E' \gg m_0c^2,\ n' \gg 1)$ ، أما الانتقالات إلى الحالة الأساسية أو إلى الحالة الأقل تهيجا $(n = 0, 1, 2, \dots)$ فتتضاءل أسيا وتعطى اسهاما مهملا فى شدة الاشعاع عندما $\mathcal{H} \ll \mathcal{H}_0$.ولكن الوضع يتغير تماما عندما يقترب الحقل $\mathcal{H}$ من القيمة الحدية $\mathcal{H}_0$ أو يزيد عليها $(\mathcal{H} \gtrsim \mathcal{H}_0)$ ، إذ أن الحالة النهائية للالكترون لا تصبح عندئذ شبه كلاسيكية لأن الانتقالات إلى حالات ذات أعداد كوانتية صغيرة $n' = 0, 1, 2, \dots$ تسهم فى الاحتمال الكلى للانتقال ، وفى الحالة فوق الكوانتية عندما $\xi \gg 1$ تغلب الظواهر الكوانتية ولهذا لا يمكن الانتقال إلى التقريب الكلاسيكى :

$$W^{u-qu} = \frac{2^{4/3}}{9}\,\Gamma(2/3)\,W^{cl}\,\xi^{-4/3} \qquad (30.93)$$

ويفترض حدوث الحالة فوق الكوانتية فى الاشعاعات اللاحرارية للنجوم النابضة لأن هناك أساسا للتنبؤ بأن يبلغ الحقل المغناطيسى مقدارا كبيرا : $(\mathcal{H} \sim 10^{10} - 10^{13}\ Gs)$ من أجل هذه النجوم .

و) تأثير الترجحات الكوانتية على مسار حركة الالكترون . لنحسب عدد الفوتونات الوسطى الصادر عن الالكترون خلال دورة واحدة $\tau = 2\pi R/c$ ولهذا نحسب نسبة الطاقة التى يشعها الالكترون فى دورة واحدة :

$$W^{rev} = W^{cl}\,\frac{2\pi R}{c} \qquad (30.94)$$

إلى طاقة الفوتون فى النهاية العظمى للاشعاع $\hbar\omega_m = \hbar(c/R)(E/m_0c^2)^3$

وهذه النسبة تساوى

$$N = \frac{W^{rev}}{\hbar\omega_m} \sim \frac{e_0^2}{\hbar c}\,\frac{E}{m_0c^2} \qquad (30.95)$$

ومن هنا نجد أن الكوانتات المتوافقة تصدر (تشع) بشكل ترجحى فمثلا عندما $E = 500 MeV$ يكون عدد الفوتونات المشعة خلال دور واحد ٢٠ فوتونا وهكذا يتميز الاشعاع   فى الطاقات العالية بالاصدار المتقطع للفوتونات ذات الطاقات العالية ، وتتأثر حركة الالكترون بالطبيعة الترجحية للاشعاع   ، وهذا يعود فيزيائيا إلى أنه يجب على الالكترون أن يحصل على دفعة كوانتية لا تساوى الصفز عندما يصدر الفوتون عالى التواتر (ارتجاج خاص) ، وعندئذ تنشأ ظاهرة ترجحات نصف قطر المسار الكوانتية للالكترون ، ويتحرك الالكترون حركة شبيهة بحركة جسيم عشوائى مستلما بذلك لصدمات من قبل الفوتونات المشعة . ولندرس احتمال الانتقالات فى وحدة الزمن ، ويمكن الحصول على هذا الاحتمال من (30.83) وذلك بتقسيم شدة الاشعاع على طاقة الفوتون chx ثم الجمع بحالات الاستقطاب الخطى ، أى أن :

$$w(\nu, s', \theta) = \frac{e_0^2}{\hbar R}\frac{1}{3\pi^2}\nu\left[\cos^2\theta\varepsilon K^2_{1/3}\left(\frac{\nu}{3}\varepsilon^{3/2}\right) + \varepsilon^2 K^2_{2/3}\left(\frac{\nu}{3}\varepsilon^{3/2}\right)\right] I^2_{ss'}(x) \qquad (30.96)$$

ونلاحظ أنه يدخل فى هذه العبارة المضروب $I^2_{ss'}(x)$ الذى يتناسب متحوله مع ثابت بلانك ، انظر (30.74) ، وهذا المضروب لا يؤثر على شدة الاشعاع عند حسابها كلاسيكيا لأن $\sum_{s'} I^2_{ss'}(x) = 1$ ، غير أن الدفع الناتج عن الفوتونات الصادرة يؤدى إلى قفزات لمركز المسار الدائرى أى إلى زيادة الترجح التربيعى $\xi^2 = s/2\gamma$ ، ولنحسب تغيير العدد القطرى الكوانتى بالنسبة للزمن :

$$\frac{ds}{dt} = \sum_{s', \nu}\int_0^{\pi}\sin\theta\, d\theta\,(s'-s)\, w(\nu, s', \theta) \qquad (30.97)$$

وإذا علمنا أن

$$\sum_{s'}(s'-s) I^2_{ss'}(x) = x \qquad (30.98)$$

فإننا نجد بواسطة (30.96) أن :

$$\frac{ds}{dt}=\frac{55}{48\sqrt{3}}\frac{ce_0^2}{m_0c^2R^2}\left(\frac{E}{m_0c^2}\right)^6 \qquad (30.99)$$

ومنه ينتج أن الترجح التربيعي لنصف القطر يزداد مع الزمن

$$\frac{d\bar{\xi}^2}{dt}=\frac{55}{48\sqrt{3}}c\frac{e_0^2}{m_0c^2}\frac{\hbar}{m_0cR}\left(\frac{E}{m_0c^2}\right)^5 \qquad (30.100)$$

وهذا التغيير يتناسب مع ثابت بلانك أى أنه فى الواقع ظاهرة كوانتية ، ويبرهن تحليل النتائج التى تم الحصول عليها ان اضطراب الترجحات الكوانتية للقطر يكون ممكنا عندما تحقق طاقة الالكترون العلاقة

$$E\gtrsim E_{1/5}=m_0c^2\left(\frac{2}{3}\frac{m_0cR}{\hbar}\right)^{1/5} \qquad (30.101)$$

(مع العلم أن $E_{1/5}$ تساوى تقريبا 500MeV) وهذا ما يمكن ملاحظته فى مسرعات الالكترونات والبوزيترونات ، وهكذا نرى أنه عندما تكون طاقة الالكترون من رتبة $E_{1/5}$ يمكن أن تنشأ وضعية غير متوقعة بوصف دوران الالكترون حول اتجاه الحقل المغناطيسى بالنظرية الكلاسيكية ، بينما تخضع الحركة فى الاتجاه القطرى إلى قوانين الميكانيكا الكوانتية لأن هذه الحركة مجهرية فى طبيعتها ، إذ لا يمكن حساب الاحداثيات القطرية إلا باحتمال معين . ومن الطبيعى أن نسمى مثل ذلك بالذرة الماكروسكوبية لأن لترجحات المسار الكوانتية فى حقل مغناطيسى أهمية عملية كبرى وخاصة عند وضع ما يسمى بالحلقات التجمعية الالكترونية والبوزيترونية ، فمن المعلوم أنه ينشأ فى الحقل المغناطيسى غير المتجانس،الذى يطبق فى المجمعات بغرض التركيز المحرقى (البؤرى) للالكترونات والبوزيترونات،تخامد اضافى يقلل من سعتها ، وينتج عن ذلك توازن بين التوسيع الكوانتى والتضييق الكلاسيكى للمسار ، وهذا ما يؤدى إلى أبعاد قطرية محدودة لحزمة الجسيمات المسرعة .

د) ظاهرة الاستقطاب الذاتى للالكترونات . إذا انتبهنا إلى العلاقة (30.90) التى تعطى شدة الاشعاع دون اهمال التصحيحات الكوانتية فليس من الصعب ملاحظة أن طاقة الاشعاع تتبع اتجاه مغزل الالكترون بالنسبة إلى اتجاه الحقل المغناطيسى ، ومن هنا نستنتج أن الاشعاع يجب أن يمهد السبيل لظهور استقطاب عرضى للالكترونات ، ولكى نحلل هذه الظاهرة نعود إلى احتمال الانتقال فى ثانية واحدة ، أى أن :

$$w(\zeta, \zeta') = \frac{e_0^2}{2\pi\hbar} \int_0^{n} d\nu \int_0^{\infty} \varkappa\, d\varkappa \oint d\Omega\, \delta(\varkappa + K' - K)(\Phi_2 + \Phi_3) \qquad (30.102)$$

وهنا تم الجمع بـ s' (العدد القطرى) وكذلك باستقطاب الفوتونات أما الجمع برقم التوافقى فغيّر بتكامل ، ولنأخذ عبارة الانتقالات الكوانتية هذه ولندرس الانتقالات التى تترافق بتغيير اتجاه المغزل أى دوما $\zeta' = -\zeta$ فى كل العناصر المصفوفية للمصفوفة α ، وعندئذ نحصل ، بالمحافظة على الحدود التى لا تنعدم عندما ننهى $\hbar$ إلى الصفر ، على ما يلى :

$$\left.\begin{matrix} -\,i\bar{\alpha}_1 \\ \bar{\alpha}_2 \end{matrix}\right\} = -\frac{1}{4}\,\xi y \cos\theta \left(I_{n,\,n'-1}(x) \pm I_{n-1,\,n'}(x)\right) I_{ss'}(x) =$$

$$= -\frac{\xi y \cos\theta}{2\pi\sqrt{3}} \left\{\begin{matrix} \sqrt{\varepsilon}\, K_{1/3}\left(\frac{\nu}{3}\,\varepsilon^{3/2}\right) \\ -\,\varepsilon K_{2/3}\left(\frac{\nu}{3}\,\varepsilon^{3/2}\right) \end{matrix}\right\} I_{ss'}(x) \qquad (30.103)$$

$$\bar{\alpha}_3 = \frac{1}{2}\Big\{I_{n-1,n'-1}(x) - I_{nn'}(x) -$$

$$- \frac{1}{2}\,\zeta\sqrt{\varepsilon_0}\,\xi y\left(I_{n-1,\,n'-1}(x) + I_{nn'}(x)\right)\Big\}\, I_{ss'}(x) =$$

$$= -\frac{\xi y}{2\pi\sqrt{3}}\left[\varepsilon K_{2/3}\left(\frac{\nu}{3}\,\varepsilon^{3/2}\right) + \zeta\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0}\, K_{1/3}\left(\frac{\nu}{3}\,\varepsilon^{3/2}\right)\right] I_{ss'}(x) \qquad (30.104)$$

وهنا غيرنامتحول التكامل بالشكل التالى :

$$\frac{\varkappa}{K} = \xi y \qquad (30.105)$$

وبما أن العناصر المصفوفية بالمصفوفات الثلاثة تتناسب مع ξ (أى مع ثابت $\hbar$) فيمكن تطبيق التقريب نصف الكوانتى على توابع لاجير بدلالة توابع

بيسل (30.77) والتعبير عنها بدلالة $K_{1/3}$ و $K_{2/3}$ ، ويجب الأخذ بعين الاعتبار العلاقة التكرارية التالية :

$$I_{n-1,\, n'-1}(x) = \frac{x}{\sqrt{nn'}}\left(\frac{n+n'-x}{2x} I_{nn'}(x) - I'_{nn'}(x)\right) \qquad (30.106)$$

التى ينتج منها $(x \ll n+n',\ n+n' \approx 2\sqrt{nn'})$ أن :

$$I_{n-1,\, n'-1}(x) - I_{nn'}(x) = -\frac{x}{n} I'_{nn'}(x) = -\xi y J'_{\nu}(\nu\beta\sin\theta) \qquad (30.107)$$

وذلك بسبب تحقق العلاقتين

$$I_{nn'}(x) = J_{\nu}(2\sqrt{xn}), \qquad I'_{nn'}(x) = \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{x}} J'_{\nu}(2\sqrt{xn}) \quad (30.108)$$

وهكذا نحصل على معادلة لحساب احتمال الانتقالات ، إذ يدخل فيها تابع بيسل ذو الوسيط العقدى $K_{2/3}$ و $K_{1/3}$ ، وإذا استكملنا بالزوايا $d\Omega$ فى (30.102) فإننا نحصل على العلاقة التالية :

$$w(\zeta, -\zeta)^{\uparrow\downarrow} = \frac{\sqrt{3}}{2\pi h}\frac{e_0^2}{R}\frac{E}{m_0c^2}\int_0^{\infty} dy\, \xi^2 y^2 \frac{1}{2}\left[K_{1/3}(y) + \zeta K_{2/3}(y)\right] \quad (30.109)$$

ومنه نجد أخيرا النتيجة النهائية :

$$w^{\uparrow\downarrow} = \frac{1}{2\tau_0}\left[1 + \zeta\frac{8\sqrt{3}}{15}\right] \qquad (30.110)$$

التى يعطى فيها زمن الاستقطاب τ_0 بالعلاقة :

$$\tau_0 = \frac{8h^2}{5\sqrt{3}\, m_0 c e_0^2}\left(\frac{m_0c^2}{E}\right)^2\left(\frac{\mathcal{H}_0}{\mathcal{H}}\right)^3 \qquad (30.111)$$

وينتج من هذه العبارة أن احتمال الانتقال من الحالة $\zeta = 1$ (يتجه المغزل باتجاه الحقل) إلى الحالة $\zeta' = -1$ (يتجه المغزل بعكس اتجاه الحقل المغناطيسى) سيكون أكبر بكثير من الاحتمال المعاكس ، ولنحسب قانون تغيير المغزل الوسطى (أى الاستقطاب) بالنسبة للزمن فنجد أن :

$$\frac{d\zeta}{dt}=\sum_{\zeta'}(\zeta'-\zeta)\,w(\zeta,\zeta')=-2\zeta w=-\frac{\zeta}{\tau_0}\left(1+\zeta\frac{8\sqrt{3}}{15}\right) \quad (30.112)$$

وباستكمال هذه المعادلة نجد أن :

$$\zeta(t)=-\frac{8\sqrt{3}}{15}+\left[\zeta(0)+\frac{8\sqrt{3}}{15}\right]e^{-\frac{t}{\tau_0}} \quad (30.113)$$

وهكذا نرى أنه بالنسبة للفترات الزمنية $t \gg \tau_0$ الأكبر من زمن الاستقطاب τ_0 ، نحصل على الكترونات تكتسب أفضلية توجيه المغزل بعكس اتجاه الحقل المغناطيسى الخارجى مهما كان وضع مغزلها الابتدائى :

$$\zeta=-\frac{8\sqrt{3}}{15}=-0,924 \quad (30.114)$$

وإذا كان التيار الابتدائى غير مستقطب $\zeta(0)=0$ فإن (30.113) تكتب بالشكل التالى :

$$\zeta(t)=-\frac{8\sqrt{3}}{15}\left(1-e^{-t/\tau_0}\right) \quad (30.115)$$

ولنلاحظ أن مغزل البوزيترونات سيتجه بعكس اتجاه مغزل الالكترونات أما الزمن τ_0 الذى يحدث خلاله الاستقطاب فهو من رتبة ساعة واحدة عندما $E \sim 1\text{GeV}$ و $\mathcal{H} \sim 10^4\text{Gs}$ ، ولهذا يمكن لهذه الظاهرة أن تستدعى الاهتمام عند حركة الحزم الالكترونية البوزيترونية فى الحلقات التجميعية ، وقد أكدت التجارب التى أجريت فى فرنسا والاتحاد السوفيتى والولايات المتحدة على وجود ظاهرة الاستقطاب الذاتى للالكترونات والبوزيترونات ، هذه الظاهرة التى تكتسب أهمية كبيرة عند الحصول على حزم من الجسيمات السريعة وهذا ما يزيد من امكانيات اجراء التجارب الفيزيائية فى فيزياء الطاقات العالية .

المحتويات

القسم الأول ـ الميكانيكا الكوانتية اللانسبية

القسم الثانى . الميكانيكا الكوانتية النسبية

القسم الثالث . النظرية الكوانتية للجسيمات

القطرى (٦١٦) ؛ د) النظرية الكوانتية للاشعاع السينكروترونى؛ الظواهر الاستقطابية (٦١٨) ؛ هـ) صيغة شوت الكلاسيكية دون إهمال استقطاب الاشعاع (٦٢٤) ؛ و) تأثير الترجحات الكوانتية على مسار حركة الالكترون (٦٣١) ؛ حـ) ظاهرة الاستقطاب الذاتى للالكترونات (٦٣٤) .

أيها القارىء العزيز .

تصدر دار « مير » للطباعة والنشر مختلف الكتب فى مجالات العلم والهندسة والطب .والمختارة من أفضل المراجع الجامعية وكذلك بعض الكتب العلمية المبسطة . وهذه الكتب تصدر باللغة العربية واللغات الأجنبية الأخرى .

ويسر الدار معرفة رأيكم فى هذه الكتب وتكون شاكرة لكم لو أبديتم لها ملاحظاتكم حول مضمونها وترجمتها وتصميمها الفنى .

قاموس المصطلحات

action function	تابع الفعل (التأثير)
adiabatic	أدياباتي، مكظوم، كظوم
bands	شرائط، عصابات
canonical equation	معادلة قانونية، معادلة قياسية
cathode	كاتود، مهبط
coherent	مترابط، متماسك، مرصوص
commutative	تبديلي، تبادلي
conservation	مصونية، حفظ
decay	تفكك، انشطار
density	كثافة، غزارة
diffraction	انعطاف، انعراج
dispersion	تشتت، تبدد
energy level	سوية طاقة، سوية طاقوية
fluctuation	ترجح، تقلّب
frequency	تردد، تواتر
group velocity	سرعة رزمية، سرعة المجموعة
hermite conjugate operator	مؤثر هيرميتي مقترن، مؤثر مرافق هيرميتياً
intensity	تشديد، تقوية، تسعير
interaction	تأثير متبادل، تفاعل
method of hooks	طريقة المنعطفات، طريقة المشابك
modulus	قيمة مطلقة، طويلة
momentum	اندفاع، دفع، زخم، كمية الحركة
quantum ensembles	جوقات كوانتية، جمل كوانتية
rotator	دوّارة، دوّار
scattering	تبدد، تشتت، تبعثر، تناثر
smearing function	تابع (دالة) غامض تابع موسع
spin	مغزل، سبين
stationarity	استقرار، رسوخ
tensor	تنسور، تنزور، رتل
transmitted wave	موجة خارقة (نافذة)
unit interval	مجال الواحدة، مجال واحدي، مجال الوحدة
unitary operator	مؤثر واحدي، وحداني
variational method	طريقة التغايرات، طريقة التغيرات .
wave packet	رزمة موجية، باقة موجية
zona	منطقة، موضع